

**Entwicklung eines Neutronentransportmoduls
für das Strahlungstransportprogramm AMOS**

DISSERTATION

zur Erlangung des akademischen Grades

**Doctor rerum naturalium
(Dr. rer. nat.)**

vorgelegt

**der Fakultät Mathematik und Naturwissenschaften
der Technischen Universität Dresden**

von

Dipl.-Phys. Kai Helbig,

geboren am 11. 02. 1986 in Karl-Marx-Stadt

Eingereicht am 09. 04. 2013

korrigierte Fassung vom 12. 09. 2013

Inhaltsverzeichnis	i
Symbolverzeichnis	iii
1 Einleitung	1
2 Theoretische und methodische Grundlagen des Strahlungstransports	3
2.1 Theoretische Grundlagen des Strahlungstransports	3
2.1.1 Strahlungsfeldgrößen	3
2.1.2 Wechselwirkungsgrößen	6
2.1.3 Strahlungstransportgleichung	8
2.2 Monte-Carlo-Methoden und deren Einsatz in der Transporttheorie	12
2.2.1 Stochastische Grundlagen der Monte-Carlo-Methoden	12
2.2.2 Erzeugung von Zufallszahlen	16
2.2.3 Berechnung von Integralen mittels Monte-Carlo-Methoden	22
2.2.4 Monte-Carlo-Strahlungstransportrechnungen	26
2.2.5 Vorhandene Strahlungstransportprogramme	28
2.3 Wechselwirkungen von Neutronen	30
2.3.1 Elastische und inelastische Streuung	31
2.3.2 Thermische Neutronenstreuung	35
2.3.3 Kernreaktionen	36
3 Praktische Umsetzung des Strahlungstransportalgorithmus	39
3.1 Evaluierte Wechselwirkungsdaten	39
3.1.1 Wirkungsquerschnitte	40
3.1.2 Richtungsichten	41
3.1.3 Energie-Richtungsichten	44
3.1.4 Thermische Neutronenstreuung	46
3.2 Aufbereitung der Wechselwirkungsdaten	49
3.2.1 Verwendete Darstellung der makroskopischen Materialeigenschaften	49
3.2.2 Empirische Energiegruppenstruktur	51
3.2.3 Erzeugung von Gruppenquerschnitten	53
3.2.4 Linearisierung von Dichtefunktionen	57
3.2.5 Darstellung zweidimensionaler Dichtefunktionen	61
3.3 Neutronentransportalgorithmus	65
3.3.1 Vorhandene Infrastruktur	65
3.3.2 Programmablauf im Neutronensimulator	67
3.3.3 Zuordnung der Energiegruppen durch ein neues Lookup-Verfahren	71
3.3.4 Erheben von Stichproben mit der stochastischen Trapezmethode	74

4	Beispielrechnungen und Verifikation	77
4.1	Transmission durch eine dünne Graphitschicht	77
4.2	Emission aus Graphitkugeln	81
4.3	Fluenz und Reaktionsanzahl für ein Helium-3-Zählrohr	88
4.4	Reaktionsanzahl für ein Albedodosimeter	91
5	Diskussion und Schlussfolgerungen	97
6	Zusammenfassung	99
7	Literaturverzeichnis	101
	Erklärung	107
	Danksagung	108
A	Herleitung der integralen Strahlungstransportgleichung	109
B	Transformation der Richtung von gestreuten Teilchen	113

Symbolverzeichnis

Zur Unterscheidung von skalaren Größen werden Vektoren fett gedruckt.

grundlegende physikalische Größen und Konstanten

Symbol	Bezeichnung	Einheit
l	Länge	m
m	Masse	kg
t	Zeit	s
e	Elementarladung	A s
c	Vakuumlichtgeschwindigkeit	m s^{-1}
h	Planck'sches Wirkungsquantum	$\text{kg m}^2 \text{s}^{-1}$
\mathbf{r}	Ortsvektor	(m m m)
v	Geschwindigkeit	m s^{-1}
$p = mv$	Impuls	kg m s^{-1}
E	kinetische Energie	$\text{J} = \text{kg m}^2 \text{s}^{-2}$
E_0	Energieäquivalent der Ruhemasse, $E_0 = m_0 \cdot c^2$	J
W	relativistische Gesamtenergie, $W = E_0 + E$	J
β	v/c	
$\gamma = (1 - \beta^2)^{-1/2}$	Lorentzfaktor der relativistischen Transformation	
N	Anzahl von Teilchen	
A	Fläche	m^2
V	Volumen	m^3
$\rho(\mathbf{r}) = dN/dV$	Anzahldichte	m^{-3}
$\varrho(\mathbf{r}) = dm/dV$	Massendichte	kg m^{-3}

mathematische Ausdrücke

Symbol	Bezeichnung	Einheit
ϕ	Azimutalwinkel	rad
θ	Polarwinkel	rad
$\mu = \cos \theta$	Richtungskosinus	
Ω	Raumwinkel: Größe der Projektionsfläche eines Objekts bezüglich der Einheitskugel um den Referenzpunkt	sr
$\mathbf{\Omega}$	Richtungsvektor im dreidimensionalen Raum	
$P_l(\mu)$	Legendrepolynom l ter Ordnung	
$\delta(x)$	Delta-Distribution	$[x]^{-1}$

$\langle \cdot \rangle_g$	Erwartungswert bezüglich einer Dichtefunktion g
\circ	angewendet auf (in Verbindung mit Operator)

stochastische Größen

Symbol	Bezeichnung	Einheit
P	Wahrscheinlichkeit	
$f(x)$	Dichtefunktion einer Zufallsvariable X	$[X]^{-1}$
$F(x)$	Verteilungsfunktion einer Zufallsvariable X	
$\mathbb{E}(X)$	Erwartungswert der Zufallsvariable X	$[X]$
$\mathbb{V}(X) = \sigma^2(X)$	Varianz einer Zufallsgröße X	$[X]^2$
$\sigma(X)$	Standardabweichung einer Zufallsvariable X	$[X]$
$\mathbb{K}(X)$	Variationskoeffizient einer Zufallsvariable X , $\mathbb{K}(X) = \sigma(X)/\mathbb{E}(X)$	
S_X^2	Stichprobenvarianz	$[X]^2$
η	Leistungszahl (FOM) stochastischer Schätzer	s^{-1}

Größen der Kernphysik

Symbol	Bezeichnung	Einheit
$\sigma(E)$	energieabhängiger Wirkungsquerschnitt	m^2
$\Sigma(E)$	energieabhängige Wirkungsquerschnittsdichte	m^{-1}
$\Lambda(E) = \Sigma^{-1}(E)$	mittlere freie Weglänge	m^{-1}
$\sigma_{E\mu}(E, E', \mu)$	differentieller Wirkungsquerschnitt je Energie und Richtungskosinus	$\text{m}^2 \text{J}^{-1}$
$d_{E\mu}(E, E', \mu)$	Energie-Richtungsichte: Dichtefunktion für Sekundärenergie E' und Richtungskosinus μ für Primärenergie E	J^{-1}
$f(E, E')$	Dichtefunktion der Sekundärenergie E' bei bekannter Primärenergie E	
$g(E, \mu E')$	bedingte Richtungsichte bei bekannter Primär- energie E und Sekundärenergie E'	
α	relative Kernmasse (je Neutronenmasse)	
Q	Q-Wert: Energieäquivalent der Massendifferenz vor und nach einer Reaktion	J
Y	Ausbeute einer Reaktion (Yield)	
$S(k, \omega)$	dynamischer Strukturfaktor	

Strahlungsfeldgrößen

Symbol	Bezeichnung	Einheit
N	Anzahl von Teilchen	
$n_R(\mathbf{r})$	Reaktionsdichte: Anzahl von Reaktionen je Volumen	m^{-3}
$g(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t)$	zeitabhängige Phasenraumdichte	$(\text{m}^3 \text{ J sr})^{-1}$
V_r	Phasenraumvolumen: Menge von Phasenraumkoordinaten \mathbf{r} , E und $\boldsymbol{\Omega}$	$\text{m}^3 \text{ J sr}$
$\Phi(\mathbf{r})$	Teilchenfluenz	m^{-2}
$\varphi(\mathbf{r}, t) = \dot{\Phi}(\mathbf{r}, t)$	Teilchenflussdichte	$(\text{m}^2 \text{ s})^{-1}$
$\varphi_E(\mathbf{r}, E, t)$	spektrale Teilchenflussdichte	$(\text{m}^2 \text{ s J})^{-1}$
$\varphi_{E\Omega}(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t)$	spektrale Teilchenradianz	$(\text{m}^2 \text{ s J sr})^{-1}$
$\chi_{E\Omega}(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t)$	spektrale, raumwinkelbezogene Emissionsraten- dichte	$(\text{m}^2 \text{ s J sr})^{-1}$
$\zeta_{E\Omega}(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t)$	spektrale, raumwinkelbezogene Stoßratendichte	$(\text{m}^2 \text{ s J sr})^{-1}$
$\chi_i(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t)$	spektrale, raumwinkelbezogene Emissionsraten- dichte i ter Stoßordnung	$(\text{m}^2 \text{ s J sr})^{-1}$
$\zeta_i(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t)$	spektrale, raumwinkelbezogene Stoßratendichte i ter Stoßordnung	$(\text{m}^2 \text{ s J sr})^{-1}$
$\mathcal{C}(E' \rightarrow E, \boldsymbol{\Omega}' \rightarrow \boldsymbol{\Omega})$	Stoßintegraloperator	
$\mathcal{T}(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}, t' \rightarrow t)$	Transportintegraloperator	

1 Einleitung

Neutronen sind ein wichtiger Bestandteil der stofflichen Materie. Als freie Neutronen finden sie aufgrund ihrer physikalischen Eigenschaften in vielen Fachgebieten Verwendung, unter anderem in der Strahlungsphysik, der Kernphysik, der Festkörperphysik und der medizinischen Physik. Neutronen sind als ionisierende Strahlung aber auch im Sinne des Strahlenschutzes relevant, da sie eine mögliche Gefahr für Mensch und Umwelt darstellen.

In den meisten Anwendungsbereichen ist eine genaue Charakterisierung des Strahlungsfelds durch die Fluenz oder von ihr abgeleiteten Größen [1], [2], [3] nützlich oder sogar zwingend notwendig. Eine Berechnung von Neutronenausbreitung ist prinzipiell mit deterministischen und Monte-Carlo-Methoden möglich. Bei deterministischen Verfahren wächst die für eine vorgegebene Genauigkeit notwendige Anzahl an Stützstellen geometrisch mit der Dimensionalität des Problems, während bei der Monte-Carlo-Methode die notwendige Stichprobenzahl von der Anzahl der Dimensionen unabhängig ist. Da die fundamentale Transportgleichung selbst im stationären Fall in sechs Dimensionen vorliegt, ist eine Berechnung mit Monte-Carlo-Methoden typischerweise effizienter und flexibler als eine deterministische Lösung.

Es existieren bereits mehrere umfassende Programmpakete für die Berechnung von Neutronentransportproblemen mittels Monte-Carlo-Methoden, wie zum Beispiel MCNP [4], FLUKA [5], MORSE [6], PHITS [7], GEANT [8], oder TART [9]. Die meisten dieser Programme werden bereits seit über 30 Jahren entwickelt und sind daher konzeptionell nicht auf die moderne Rechnerarchitektur optimiert. Außerdem sind die bisherigen Programme entweder auf maximale Detailtreue (MCNP, PHITS, GEANT) oder auf Rechengeschwindigkeit (MORSE, TART, FLUKA) ausgerichtet.

Das am Institut für Kern- und Teilchenphysik der Technischen Universität Dresden entwickelte Monte-Carlo-Strahlungstransportprogramm AMOS [10], [11] für Photonen und Elektronen stellt einen Mittelweg zwischen beiden Herangehensweisen dar. Die Wirkungsquerschnitte werden für eine schnelle Auswertung in linear äquidistanten Energiegruppen dargestellt. In dem interessierenden Energiebereich von etwa drei Größenordnungen (~ 10 keV bis ~ 10 MeV) lässt sich mit etwa 1000 Gruppen eine hervorragende Genauigkeit der Ergebnisse erreichen [11]. Durch die spezielle Geometriebehandlung über einen binären Baum und damit verbundene Vermeidung redundanter Abfragen sind Transportrechnungen auch in komplizierten Anordnungen effizient möglich.

Bei der Erweiterung von AMOS für effiziente Neutronentransportberechnungen mit hoher Genauigkeit ist der bisherige Ansatz mit linearer Gruppeneinteilung jedoch nicht anwendbar. Zum einen erstreckt sich der relevante Energiebereich für Neutronen von 10^{-3} eV bis etwa $2 \cdot 10^7$ eV über mehr als zehn Größenordnungen. Zum anderen sind zur Beschreibung der vielen ausgeprägten Resonanzen deutlich detailliertere Wechselwirkungsdaten erforderlich. Im Extremfall von ^{238}U wird der totale Wirkungsquer-

schnitt beispielsweise in den Datenbibliotheken JEFF-3.1 [12] und ENDF-B/VII.0 [13] jeweils mit über 100.000 Stützstellen angegeben.

Im Gegensatz zu Photonen und Elektronen besteht bei vielen Neutronenreaktionen auch kein eindeutiger Zusammenhang zwischen Energie und Richtung der gestreuten Teilchen. Stattdessen müssen für beide Größen Stichproben aus zweidimensionalen Energie-Richtungsverteilungen erhoben werden. Dies erfordert eine effiziente Methode zur Erzeugung mehrdimensionaler Stichproben. Eine weitere Herausforderung stellt die Simulation von thermischer Neutronenstreuung dar, bei der durch die Eigenbewegung der Atomkerne Energie und Richtung des gestreuten Teilchens im Laborsystem zu abhängigen Zufallsvariablen werden.

Die Verwendung von für den Transport aufbereiteten Wechselwirkungsdaten ist Grundlage aller genannten Strahlungstransportalgorithmen. Zu jedem Programmpaket werden Wechselwirkungsdaten wichtiger Nuklide in proprietären Formaten mitgeliefert. Die detaillierteste Darstellung bietet derzeit immer noch das mit dem Programm NJOY [14], [15] erzeugbare ACE-Format [4], welches sowohl von MCNP als auch von PHITS verwendet wird. Die mikroskopischen Wirkungsquerschnitte werden darin punktweise mit linearer Interpolationsvorschrift dargestellt. Differentielle Wirkungsquerschnitte werden in Form von Dichtefunktionen angegeben, wobei durchaus verschiedene Darstellungen zum Einsatz kommen können. Die Interpolation der Querschnitte und die Verwendung unterschiedlicher Repräsentationen wirken sich jedoch nachteilig auf die Rechengeschwindigkeit aus. Durch eine unvollständige Dokumentation ist der genaue Aufbereitungsvorgang in NJOY schwer nachvollziehbar und eventuelle Anpassungen sind daher sehr aufwändig.

Auch die Datendarstellungen der anderen Programme erscheinen nicht für die Zielstellung eines sowohl schnellen als auch genauen Transportalgorithmus geeignet. Daraus ergibt sich die Notwendigkeit, zunächst ein unabhängiges Programm zur transparenten Datenaufbereitung zu entwerfen und umzusetzen. Das Ziel ist die Umwandlung frei zugänglicher evaluierter Wechselwirkungsdaten in einheitliche Darstellungen der differentiellen und integralen Wirkungsquerschnitte. Analytische Funktionen sind dabei durch möglichst einfach und schnell auszuwertende Näherungen zu ersetzen. Mögliche Genauigkeitsverluste sollen dabei die Größenordnung der Unsicherheit der Daten nicht überschreiten. Das in AMOS bereits für Photonen eingesetzte Konzept von energiegruppengemittelten Querschnittsdaten soll beibehalten werden. Für den Neutronentransport muss allerdings eine optimierte Gruppenstruktur erarbeitet werden.

Aufbauend auf die verarbeiteten Wechselwirkungsdaten ist ein Neutronentransportalgorithmus für das vorhandene Programmpaket AMOS zu erarbeiten. Dieser soll wie im bereits enthaltenen Photonentransportmodul analoge und nichtanaloge Berechnungen von Strahlungsfeldgrößen ermöglichen. Für die Verwendung in AMOS sind die entwickelten Algorithmen in der objektorientierten Programmiersprache C++ zu implementieren. Das neue Transportmodul soll an einigen Fragestellungen verifiziert und mit bereits vorhandenen Neutronentransportprogrammen bezüglich Genauigkeit und Geschwindigkeit verglichen werden.

2 Theoretische und methodische Grundlagen des Strahlungstransports

2.1 Theoretische Grundlagen des Strahlungstransports

Im folgenden Abschnitt werden die Grundlagen zur Beschreibung von Strahlungstransportprozessen vorgestellt. Nach einem Überblick über die wichtigsten Größen zur Beschreibung von Strahlungsfeldern wird die Strahlungstransportgleichung als fundamentales Modell des Strahlungstransports hergeleitet. Anschließend wird die formale Lösung für die integrale Form der Transportgleichung vorgestellt.

2.1.1 Strahlungsfeldgrößen

Ein Teilchenensemble kann durch eine zeitabhängige sechsdimensionale Phasenraum-dichte $g(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t)$ beschrieben werden. Dabei wird anstatt des in der Mechanik üblichen kanonischen Impulses \mathbf{p} die Energie E und Richtung $\boldsymbol{\Omega}$ der Teilchen benutzt. Die Phasenraum-dichte gibt den Erwartungswert

$$dN(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t) = g(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t) dE d\Omega dV \quad (2.1)$$

der infinitesimalen Anzahl von Teilchen am Ort \mathbf{r} an, welche sich zum Zeitpunkt t mit der Energie E in Richtung $\boldsymbol{\Omega}$ bewegen. Dabei ist $d\Omega$ ein differentielles Raumwinkelement. Allgemein entspricht der durch ein Objekt abgedeckte Raumwinkel bezüglich eines Punktes der Projektionsfläche des Objekts auf eine Einheitskugel um den Punkt. Ein differentielles Raumwinkelement lässt sich insbesondere durch ein Oberflächenelement

$$d\Omega = \sin \theta d\theta d\phi = -d\mu d\phi \quad (2.2)$$

des Einheitskreises in Kugelkoordinaten darstellen (vgl. Abbildung 2.1). Dabei bezeichnet $\theta \in [0, \pi]$ den Polarwinkel, $\phi \in [0, 2\pi]$ den Azimutalwinkel und $\cos \theta \stackrel{\text{def}}{=} \mu \in [-1, 1]$ den sogenannten Richtungskosinus.

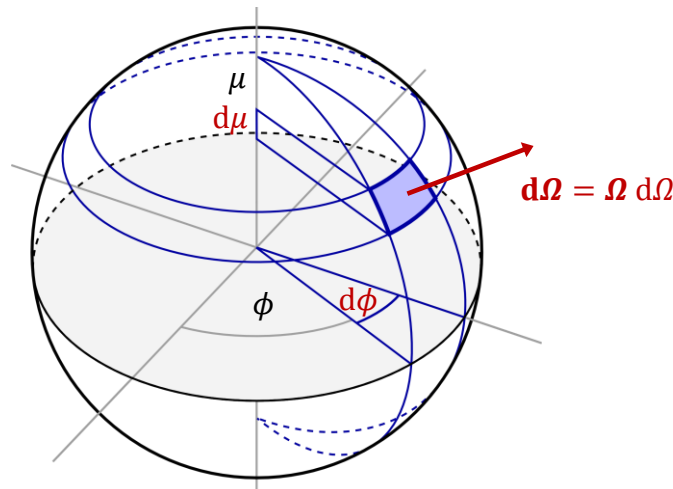


Abbildung 2.1: Differentieller Raumwinkel $d\Omega$ in Kugelkoordinaten mit zugehörigem Richtungsvektor $\boldsymbol{\Omega}$.

Der oben verwendete Richtungsvektor $\boldsymbol{\Omega}$ ist in diesem Zusammenhang als Normalenvektor eines differentiellen Raumwinkelements $d\Omega$ zu verstehen. Die Integration über den gesamten Raumwinkel von 4π entspricht dabei der Integration über alle Richtungsvektoren auf der Einheitskugel.

Die Phasenraumdichte ist im Allgemeinen nicht experimentell zugänglich. Im Rahmen der Strahlungstransporttheorie wird stattdessen die sogenannte spektrale Teilchenradianz herangezogen. Diese ist über

$$\varphi_{E\Omega}(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t) \stackrel{\text{def}}{=} \lim_{\substack{\Delta A \rightarrow 0, \Delta E \rightarrow 0, \\ \Delta \Omega \rightarrow 0, \Delta t \rightarrow 0}} \langle M(\mathbf{r}, \Delta A, E, \Delta E, \boldsymbol{\Omega}, \Delta \Omega, t, \Delta t) \rangle_g \quad (2.3)$$

definiert [2], [3] und beschreibt die Anzahl von Teilchen, welche zum Zeitpunkt t mit einer Energie E senkrecht durch eine differentielle Fläche mit Mittelpunkt \mathbf{r} und Normalenvektor $\boldsymbol{\Omega}$ treten.

Die zugrundeliegende Messgröße

$$M(\mathbf{r}, \Delta A, E, \Delta E, \boldsymbol{\Omega}, \Delta \Omega, t, \Delta t) = \frac{\Delta N(\mathbf{r}, \Delta A, E, \Delta E, \boldsymbol{\Omega}, \Delta \Omega, t, \Delta t)}{\Delta A \Delta E \Delta \Omega \Delta t} \quad (2.4)$$

ist die Anzahl von Teilchen ΔN , welche im Zeitintervall $[t, t + \Delta t]$ mit einer Energie $[E, E + \Delta E]$ und einer Richtung im Raumwinkel $\Delta \Omega$ um $\boldsymbol{\Omega}$ durch eine Fläche ΔA mit Mittelpunkt \mathbf{r} und Normalenvektor $\boldsymbol{\Omega}$ treten. Diese ist eine von der Konfiguration des Phasenraums abhängige stochastische Größe. Die spektrale Radianz ergibt sich aus dem Erwartungswert dieser Größe bezüglich der Phasenraumdichte g und anschließend dem Übergang zu infinitesimalen Intervallen [16].

Die spitzen Klammern $\langle \cdot \rangle_g$ in (2.3) bezeichnen dabei den Erwartungswert von ΔN bezüglich der Phasenraumdichte g über das betroffene Phasenraumvolumen $V_r = \Delta E \cdot \Delta \Omega \cdot \Delta V$. Es gilt

$$\begin{aligned} \langle M(\mathbf{r}, \Delta A, E, \Delta E, \boldsymbol{\Omega}, \Delta \Omega, t, \Delta t) \rangle_g &= \frac{1}{\Delta A \Delta E \Delta \Omega \Delta t} \cdot \langle \Delta N(\mathbf{r}, \Delta A, E, \Delta E, \boldsymbol{\Omega}, \Delta \Omega, t, \Delta t) \rangle_g \\ &= \frac{1}{\Delta A \Delta E \Delta \Omega \Delta t} \cdot \int_{V_r} dN \\ &= \frac{1}{\Delta A \Delta E \Delta \Omega \Delta t} \cdot \int_{\Delta E} \int_{\Delta \Omega} \int_{\Delta V} g(\mathbf{r}', E', \boldsymbol{\Omega}', t') dV' d\Omega' dE', \end{aligned} \quad (2.5)$$

wobei das Volumenelement ΔV gerade diejenigen Orte umfasst, von denen aus Teilchen die Querschnittsfläche ΔA im vorgegebenen Zeit- und Raumwinkelbereich durchqueren können.

Ist die Ausdehnung des Volumens ΔV klein gegen den mittleren Abstand aufeinanderfolgender Wechselwirkungen, so geht die Wahrscheinlichkeit einer Wechselwirkung gegen null. Enthält das Volumen außerdem keine Teilchenquellen, so findet lediglich eine gleichförmige Bewegung mit der Geschwindigkeit $v(E)$ statt. In diesem Fall kann das

Volumen ΔV näherungsweise durch $\Delta A \cdot v(E) \cdot \Delta t$ und die Volumenintegration durch eine Flächen- und Zeitintegration ersetzt werden. Das Flächendifferential $dA_{\perp}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}')$ berücksichtigt dabei nur solche Beiträge der Dichte g , welche in der Fläche ΔA liegen und sich parallel zu einer Richtung $\boldsymbol{\Omega}'$ im Raumwinkel $\Delta\Omega'$ um die Flächennormale $\boldsymbol{\Omega}$ bewegen. Damit geht (2.5) in den Ausdruck

$$\begin{aligned} & \langle M(\mathbf{r}, \Delta A, E, \Delta E, \boldsymbol{\Omega}, \Delta\Omega, t, \Delta t) \rangle_g \\ &= \frac{1}{\Delta A \Delta E \Delta\Omega \Delta t} \int_{\Delta E} \int_{\Delta\Omega} \int_{\Delta A} \int_{\Delta t} g(\mathbf{r}', E', \boldsymbol{\Omega}', t') v(E') dt' dA_{\perp}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}') d\Omega' dE' \end{aligned} \quad (2.6)$$

über. Für den Grenzübergang zum Differentialquotienten kann der Hauptsatz der Differential- und Integralrechnung verwendet werden. Damit ergibt sich schließlich über

$$\varphi_{E\Omega}(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t) = g(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t) \cdot v(E) \quad (2.7)$$

ein einfacher Zusammenhang mit der Phasenraumdichte [16]. Die spektrale Teilchenradianz entspricht also dem Produkt aus der Phasenraumdichte und der Teilchengeschwindigkeit.

Durch Integration der spektralen Teilchenradianz werden weitere wichtige Größen des Strahlungstransports definiert. Eine Elimination der Richtungsabhängigkeit ergibt die spektrale Teilchenflussdichte [2], [3]

$$\varphi_E(\mathbf{r}, E, t) = \iint_{4\pi} \varphi_{E\Omega}(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t) d\Omega, \quad (2.8)$$

welche die Anzahl von Teilchen pro Fläche und Zeit angibt, welche mit Energie E aus allen Richtungen zum Zeitpunkt t durch eine infinitesimale Querschnittsfläche dA_{\perp} am Ort \mathbf{r} fliegen. Dabei ist die Fläche immer senkrecht zur Flugrichtung ausgerichtet. Eine Integration bezüglich der Energie definiert die Teilchenflussdichte [1], [2], [3]

$$\varphi(\mathbf{r}, t) = \int_0^{\infty} \varphi_E(\mathbf{r}, E, t) dE, \quad (2.9)$$

welche die Gesamtzahl von Teilchen pro Zeit angibt, die durch eine infinitesimale Querschnittsfläche um den Ort \mathbf{r} fliegen. Sie kann nur nichtnegative Werte annehmen und ist additiv bezüglich unterschiedlicher Einfallsrichtungen. Damit ist sie proportional zur Reaktionsrate am jeweiligen Ort.

Eine weitere relevante Größe ist die Teilchenfluenz

$$\Phi(\mathbf{r}) = \int_0^t \varphi(\mathbf{r}, t') dt', \quad (2.10)$$

als zeitliches Integral der Flussdichte [1], [2], [3]. Diese gibt die absolute Anzahl von Strahlungsteilchen an, welche im vorgegebenen Zeitintervall $[0, t]$ eine infinitesimale Querschnittsfläche um den Ort \mathbf{r} durchquert haben. Diese ist besonders für die Beschreibung von Problemen interessant, bei denen die tatsächliche Zeitabhängigkeit des Strahlungsfelds keine Rolle spielt.

Aus Integration des Ausdrucks (2.7) ergibt sich, dass die Fluenz an einem Punkt

$$\Phi(\mathbf{r}) = \int_0^t \langle v(t') \rangle_g dt' = \lim_{\Delta V \rightarrow 0} \frac{\Delta l}{\Delta V} \quad (2.11)$$

gerade dem Verhältnis der Spurlänge Δl aller Teilchen in einem infinitesimalen Volumen ΔV um diesen Punkt und dem Volumen entspricht [17], [18]. Die differentiellen Formen $\varphi_{E\Omega}$ und φ_E der Teilchenflussdichte φ können analog auch für die Fluenz definiert werden. Dabei wird von der spektralen Teilchenfluenz Φ_E bzw. der spektralen, raumwinkelbezogenen Teilchenfluenz $\Phi_{E\Omega}$ gesprochen.

Da Neutronenwechselwirkungen in einem Energiebereich von mehr als zehn Größenordnungen zu Messeffekten beitragen können, werden spektrale Strahlungsfeldgrößen auch in Form einer sogenannten Lethargiedarstellung angegeben. Dabei wird die Größe nicht bezüglich der Energie E sondern bezüglich ihres natürlichen Logarithmus (der sogenannten Lethargie) dargestellt. Damit die Flächenverhältnisse bezüglich der Abszisse

$$\int_{E_0}^{E_1} f_E(E) dE = \int_{\ln E_0}^{\ln E_1} f_E(E) \cdot E d(\ln E) \quad (2.12)$$

gewahrt bleiben, wird die spektrale Größe in Lethargiedarstellung mit der Energie multipliziert.

2.1.2 Wechselwirkungsgrößen

Zusätzlich zu den so definierten Strahlungsfeldgrößen werden weiterhin Größen zur Beschreibung der Teilchenwechselwirkung eingeführt. Der mikroskopische Wirkungsquerschnitt σ eines Targets (Atom oder Molekül) bezüglich einer bestimmten Reaktion mit Teilchen der Energie E und Fluenz Φ ist als das Verhältnis der mittleren Anzahl solcher Reaktionen N je Target und der Fluenz über

$$\sigma(E) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{N}{\Phi} \quad (2.13)$$

definiert [2]. Wenn an einem Target mehrere Reaktionen stattfinden können, bestimmt sich der totale Wirkungsquerschnitt σ_t durch Summation der Reaktionsquerschnitte.

In der Definition wird implizit vorausgesetzt, dass die Fluenz Φ das Strahlungsfeld bereits vollständig charakterisiert. Aufgrund der Forderung monoenergetischer Teilchen ist keine Energieabhängigkeit vorhanden. Es muss jedoch angenommen werden,

dass die Anzahl der Reaktionen nicht von der Orientierung zwischen einfallenden Teilchen und Target abhängt. Diese Isotropie liegt in fast allen Praxisfällen vor.

Zur vollständigen Beschreibung des Wechselwirkungsprozesses ist die Kenntnis der Verteilung der Energie E' und Richtung $\boldsymbol{\Omega}'$ der emittierten Teilchen bezüglich der Richtung $\boldsymbol{\Omega}$ des streuenden Teilchens notwendig. Diese wird durch den differentiellen Wirkungsquerschnitt

$$\sigma_{E\Omega}(E, E', \boldsymbol{\Omega}') \stackrel{\text{def}}{=} \frac{d^2\sigma}{dE' d\Omega'} \quad (2.14)$$

angegeben [2]. Der Ausdruck ist aufgrund der angenommenen Isotropie des Streuzentrums nur von der relativen Orientierung der Richtungen $\boldsymbol{\Omega}$ und $\boldsymbol{\Omega}'$ des Teilchens vor und nach der Wechselwirkung abhängig. Für ein einheitliches Bezugssystem wird daher die Konvention $\boldsymbol{\Omega} = (0,0,1)^T$ verwendet.

Für diese Arbeit wird weiterhin die sogenannte Energie-Richtungsichte über

$$d_{E\Omega}(E, E', \boldsymbol{\Omega}') = \frac{\sigma_{E\Omega}(E, E', \boldsymbol{\Omega}')}{\sigma(E)} \quad (2.15)$$

eingeführt. Diese stellt eine mehrdimensionale Dichtefunktion dar. Unter der bereits erwähnten Annahme einer Isotropie der Targets sind Streuungen bezüglich des Azimutalwinkels ϕ gleichverteilt. Die Energie-Richtungsichte kann daher auch als Funktion des Kosinus des Polarwinkels

$$\mu(\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}') = \cos \theta = \boldsymbol{\Omega} \cdot \boldsymbol{\Omega}' \quad (2.16)$$

in Form der zweidimensionalen Dichtefunktion

$$d_{E\mu}(E, E', \mu) = \frac{2\pi \cdot \sigma_{E\Omega}(E, E', \boldsymbol{\Omega}'(\mu, \phi' = 0))}{\sigma(E)} \quad (2.17)$$

angegeben werden.

Bei bestimmten Reaktionen ändert sich neben Energie und Richtung auch die Anzahl der Strahlungsteilchen. Der Erwartungswert der Anzahl von Teilchen nach der Reaktion wird als Ausbeute $Y(E)$ bezeichnet.

Zur makroskopischen Beschreibung von Wechselwirkungen mit einem Medium wird die Wirkungsquerschnittsdichte

$$\Sigma(E) = \rho_T \cdot \sigma(E) \quad (2.18)$$

als Produkt zwischen Wirkungsquerschnitt und Anzahldichte der Targets $\rho_T = dN_T/dV$ definiert [2], [3]. Zur Interpretation wird dieser Ausdruck in die Definition des Wirkungsquerschnitts (2.13) eingesetzt und umgestellt. Für monoenergetische Teilchen der Fluenz Φ ergibt sich dabei mit

$$\Sigma \cdot \Phi = \rho_T \cdot N = \frac{dN_T}{dV} \cdot N \equiv n_R \quad (2.19)$$

die Reaktionsdichte n_R , also die Anzahl von Reaktionen je Volumenelement für Strahlungsteilchen einer vorgegebenen Energie. Die Wirkungsquerschnittsdichte liefert damit ein makroskopisches Maß für die Wechselwirkungswahrscheinlichkeit in einem Material.

Im allgemeineren Fall eines energieabhängigen Feldes berechnet sich die Reaktionsdichte durch die Integration

$$n_R = \int_0^{\infty} \Sigma(E) \cdot \Phi_E(E) dE \quad (2.20)$$

des Produktes aus der spektralen Fluenz und der Wirkungsquerschnittsdichte.

Wie im folgenden Abschnitt ersichtlich wird, gibt Σ die mittlere Anzahl von Reaktionen je Wegelement an und wird deshalb auch als linearer Schwächungskoeffizient bezeichnet. Das Inverse der Wirkungsquerschnittsdichte

$$\Lambda(E) = \frac{1}{\Sigma(E)} \quad (2.21)$$

wird als mittlere freie Weglänge bezeichnet.

2.1.3 Strahlungstransportgleichung

Mit seiner Arbeit [19] über das Wärmegleichgewicht unter Gasmolekülen legte Ludwig Boltzmann im Jahre 1872 die Grundlage für die moderne Transporttheorie. Ziel der Untersuchungen war es, die Phasenraumdichte eines Gases anhand ihrer mikroskopischen Wechselwirkungen zu berechnen. Dazu entwickelte er eine Differentialgleichung, welche die zeitliche Veränderung der Phasenraumdichte aufgrund einzelner Wechselwirkungen beschreibt. Wesentliche Voraussetzung für die Anwendung der Transporttheorie ist die Forderung, dass die mittlere Stoßdauer klein gegen den mittleren Zeitabstand zweier Stöße ist. Dies bedeutet, dass nur Zweiteilchenstöße für die Gaswechselwirkung betrachtet werden müssen [20].

Da die Reichweite der Kernkräfte von wenigen Femtometern klein gegen die mittlere freie Weglänge der Neutronen ist, lässt sich auch die Ausbreitung von Neutronen im Material näherungsweise in Wechselwirkungsorte mit kleiner Ausdehnung und unbeeinflusste geradlinig-gleichförmige Bewegung zwischen diesen Wechselwirkungsorten zerlegen. Die Anzahl von Neutronen je Volumenelement und Zeitintervall muss dafür so gering sein, dass Wechselwirkungen nur mit der stofflichen Matrix, nicht aber untereinander, stattfinden. Außerdem sollte die de-Broglie-Wellenlänge klein gegen die Gitterstruktur der Matrix sein, da sonst makroskopische Wechselwirkungen mit mehr als einem Atom stattfinden.

Die Forderung geringer Anzahldichte ist bei allen irdischen Neutronenquellen erfüllt, da die erreichten Neutronendichten deutlich unter denen von Materie von etwa $10^{20} - 10^{24} \text{ cm}^{-3}$ bleiben. Wechselwirkungen mit dem Atomgitter können hingegen insbesondere bei niedrigen Neutronenenergien nicht ausgeschlossen werden und bedürfen einer gesonderten Behandlung. Dies wird in Abschnitt 2.3.2 diskutiert.

Die folgende Herleitung der Strahlungstransportgleichung basiert im Wesentlichen auf Duderstadt und Martin [20]. Das Strahlungsfeld wird vollständig durch die Phasenraumdichte $g(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t)$ beschrieben. Ihre zeitliche Änderung setzt sich bei Abwesenheit äußerer Kräfte aus einer expliziten Zeitabhängigkeit sowie einem Driftterm zusammen. Die Strahlungstransportgleichung

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} g(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t) &= \frac{\partial}{\partial t} g(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t) + \frac{d\mathbf{r}}{dt} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} g(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t) \\ &= \chi_{E\Omega}(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t) - \zeta_{E\Omega}(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t) \end{aligned} \quad (2.22)$$

bilanziert diese Änderungen aufgrund mikroskopischer Wechselwirkungen. Dabei beschreibt die spektrale, raumwinkelbezogene Emissionsratendichte $\chi_{E\Omega}$ die Zunahme der Phasenraumdichte durch Teilchen aus Quellen und Wechselwirkungen pro Zeit. Die spektrale, raumwinkelbezogene Stoßratendichte $\zeta_{E\Omega}$ gibt hingegen die Abnahme der Phasenraumdichte pro Zeit um alle Teilchen an, welche in eine Wechselwirkung eintreten.

Unter der Annahme, dass Reaktionen jeweils an einzelnen Targets stattfinden, können beide Dichten über mikroskopische Reaktionsquerschnitte beschrieben werden. Dafür wird berücksichtigt, dass das Produkt aus Wirkungsquerschnittsdichte und spektraler Radianz $\Sigma \cdot \varphi_{E\Omega}$ nach (2.20) eine spektrale Reaktionsratendichte darstellt.

Die Emissionsratendichte

$$\begin{aligned} \chi_{E\Omega}(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t) &= s_{E\Omega}(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t) \\ &+ \iint_{4\pi} \int_0^\infty \sum_{l,m} Y^{(l,m)}(E') \cdot \Sigma_{E\Omega}^{(l,m)}(\mathbf{r}, E', E, \mu(\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}')) \\ &\cdot \varphi_{E\Omega}(\mathbf{r}, E', \boldsymbol{\Omega}', t) dE' d\boldsymbol{\Omega}', \end{aligned} \quad (2.23)$$

setzt sich dabei aus dem raumfesten Anteil der spektralen, raumwinkelbezogenen Quelldichte $s_{E\Omega}$ sowie einem Streubeitrag zusammen. Dieser entspricht einer Dichtezunahme durch Teilchen, welche aufgrund einer Reaktion m an einem Nuklid l am Ort \mathbf{r} mit Energie E in Richtung $\boldsymbol{\Omega}$ ausgesendet werden. Diese Streuquellendichte wird durch die differentiellen Wirkungsquerschnittsdichten der Streureaktionen $\Sigma_{E\Omega}^{(l,m)}$ sowie deren Ausbeuten $Y^{(l,m)}$ bestimmt.

Die Stoßratendichte

$$\zeta_{E\Omega}(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t) = \Sigma_t(\mathbf{r}, E) \cdot \varphi_{E\Omega}(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t) \quad (2.24)$$

umfasst alle Teilchen, die in eine Reaktion eintreten und entspricht damit gerade der Reaktionsratendichte der totalen Wirkungsquerschnittsdichte Σ_t .

Für die weiteren Betrachtungen wird zur kompakteren Schreibweise der sogenannte Stoßintegraloperator \mathcal{C} eingeführt [20]. Dieser steht für die Anwendung der Integration

$$\begin{aligned} & \mathcal{C}(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, \boldsymbol{\Omega}' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}) \circ f(E', \boldsymbol{\Omega}') \\ &= \iint_{4\pi} \int_0^\infty \frac{1}{\Sigma_t(\mathbf{r}, E')} \sum_{l,m} Y^{(l,m)}(E') \cdot \Sigma_{E\Omega}^{(l,m)}(\mathbf{r}, E', E, \mu(\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}')) \\ & \cdot f(E', \boldsymbol{\Omega}') dE' d\boldsymbol{\Omega}' \end{aligned} \quad (2.25)$$

auf eine beliebige Funktion $f(E', \boldsymbol{\Omega}')$. Unter Berücksichtigung von (2.7) nimmt die Strahlungstransportgleichung der spektralen Radianz $\varphi_{E\Omega} = v \cdot g$ damit den Ausdruck

$$\frac{1}{v} \frac{d}{dt} \varphi_{E\Omega} = \frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} \varphi_{E\Omega} + \boldsymbol{\Omega} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \varphi_{E\Omega} = s_{E\Omega} + \mathcal{C} \circ \Sigma'_t \cdot \varphi'_{E\Omega} - \Sigma_t \cdot \varphi_{E\Omega} \quad (2.26)$$

an. Die gestrichenen Größen Σ'_t und $\varphi'_{E\Omega}$ deuten in diesem Kontext die Koordinaten E' und $\boldsymbol{\Omega}'$ der Teilchen vor dem Stoß an. Diese sogenannte Boltzmann'sche Transportgleichung ist eine partielle Integro-Differentialgleichung in sieben Dimensionen, welche den Strahlungstransport bei Abwesenheit äußerer Kräfte vollständig beschreibt [20], [21].

Unter der Annahme, dass die spektrale Radianz am Rand des betrachteten Phasenraumvolumens verschwindet, lässt sich der Ausdruck in eine reine Integralgleichung umformen. Dafür wird der Transportintegraloperator über

$$\begin{aligned} & \mathcal{T}(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}, t' \rightarrow t) \circ f(\mathbf{r}', t') \\ &= \Sigma_t(\mathbf{r}, E) \\ & \cdot \int_{-\infty}^0 f\left(\mathbf{r} - \boldsymbol{\Omega} \cdot R, t - \frac{R}{v}\right) \cdot \exp\left(-\int_0^R \Sigma_t(\mathbf{r} - \boldsymbol{\Omega} \cdot R', E) dR'\right) dR \end{aligned} \quad (2.27)$$

eingeführt [20]. Angewendet auf eine Quelldichte beschreibt er den Beitrag der im gesamten Phasenraum emittierten Strahlungsteilchen zu einer Reaktion am Ort \mathbf{r} und zum Zeitpunkt t . Die Wahrscheinlichkeit, den Stoßpunkt ungestreut zu erreichen, nimmt dabei exponentiell mit der Flugstrecke ab.

Unter Verwendung des Transportoperators ergibt sich mit

$$\Sigma_t \cdot \varphi_{E\Omega} = \mathcal{T} \circ s'_{E\Omega} + \mathcal{T} \circ \mathcal{C} \circ \Sigma'_t \cdot \varphi'_{E\Omega} \quad (2.28)$$

die integrale Form der Strahlungstransportgleichung [20], [6]. Eine Herleitung aus der Integro-Differentialform (2.26) ist in Anhang A dargestellt. Bezogen auf die spektrale, raumwinkelbezogene Stoßratendichte $\zeta_{E\Omega} = \Sigma_t \cdot \varphi_{E\Omega}$ nach (2.24) ergibt sich

$$\zeta_{E\Omega} = \mathcal{T} \circ s'_{E\Omega} + \mathcal{T} \circ \mathcal{C} \circ \zeta'_{E\Omega} \quad (2.29)$$

Dieser Ausdruck stellt eine Fredholm'sche Integralgleichung zweiter Art dar. Deren Lösung lässt sich formal als Liouville-Neumann-Reihe

$$\begin{aligned} \zeta_{E\Omega} &= \sum_{i=0}^{\infty} \zeta_i, \text{ mit} \\ \zeta_0 &= \mathcal{T} \circ s'_{E\Omega}, \\ \zeta_{i+1} &= \mathcal{T} \circ \mathcal{C} \circ \zeta'_i \end{aligned} \quad (2.30)$$

ausdrücken [22]. Jeder Summand ζ_i beschreibt dabei den Beitrag der Teilchen, welche nach i vorangegangenen Wechselwirkungen zum Zeitpunkt t an den Ort \mathbf{r} transportiert wurden und dort in die $(i + 1)$ te Wechselwirkung eintreten. ζ_i wird auch als Stoßratendichte i ter Stoßordnung bezeichnet.

Die Liouville-Neumann-Reihe konvergiert, solange die mittlere Ausbeute von gestreuten Teilchen je Wechselwirkung \bar{Y} kleiner als eins ist. In diesem Fall ist der Beitrag i ter Ordnung zur integralen Stoßrate i ter Ordnung beschränkt durch das \bar{Y}^i -fache der Stoßrate nullter Ordnung oder Erststoßrate [22]. Dementsprechend kann die Reihe nach endlich vielen Termen abgebrochen werden. Die verwendeten Abbruchkriterien variieren je nach verwendetem Lösungsverfahren.

Die Darstellung der Strahlungstransportgleichung bezüglich der spektralen, raumwinkelbezogenen Stoßratendichte $\zeta_{E\Omega}$ ist äquivalent zur Darstellung bezüglich spektraler Radianz $\varphi_{E\Omega}$ oder spektraler, raumwinkelbezogener Emissionsratendichte $\chi_{E\Omega}$. Mit (2.21), (2.23), (2.24) und (2.29) können die Zusammenhänge

$$\varphi_{E\Omega}(\mathbf{r}, E, \Omega, t) = \Lambda(\mathbf{r}, E) \cdot \zeta_{E\Omega}(\mathbf{r}, E, \Omega, t), \quad (2.31)$$

$$\zeta_{E\Omega}(\mathbf{r}, E, \Omega, t) = \mathcal{T} \circ \chi_{E\Omega}(\mathbf{r}', E, \Omega, t') \quad (2.32)$$

hergeleitet werden. Mit (2.32) kann die Rekursionsvorschrift (2.30) über

$$\chi_{E\Omega} = \sum_i \chi_i, \quad \zeta_{E\Omega} = \sum_i \zeta_i \quad (2.33)$$

$$\chi_0 = s_{E\Omega}, \quad (2.34)$$

$$\zeta_i = \mathcal{T} \circ \chi'_i, \quad (2.35)$$

$$\chi_{i+1} = \mathcal{C} \circ \zeta'_i \quad (2.36)$$

in zwei Schritte zerlegt werden. χ_i wird als Emissionsratendichte i ter Stoßordnung bezeichnet. Sie gibt die Anzahl von Teilchen an, welche nach der i ten Wechselwirkung den Stoßpunkt verlassen.

Die primäre Emissionsratendichte χ_0 entspricht gerade der Quelldichte. Die Anwendung des Transportoperators \mathcal{T} auf eine Emissionsratendichte i ter Stoßordnung χ_i ergibt jeweils die Stoßratendichte i ter Ordnung ζ_i . Diese gibt die Anzahl von Teilchen an, welche in die $(i + 1)$ te Wechselwirkung eintreten. Durch Anwendung des Stoßintegraloperators \mathcal{C} ergibt sich daraus die Emissionsratendichte $(i + 1)$ ter Ordnung χ_{i+1} . Gleichung (2.35) wird als Transportintegral und Gleichung (2.36) als Stoßintegral bezeichnet.

Im Allgemeinen sind Lösungen der Strahlungstransportgleichung nur numerisch ermittelbar. Mögliche deterministische Lösungsverfahren für die Strahlungstransportgleichung sind die Methode der diskreten Ordinaten, die Methode der Kugelflächenfunktionen und die finite-Volumen-Methode. Weitere Lösungsverfahren existieren für die integrale Form der Strahlungstransportgleichung, so zum Beispiel die Methode der Stoßwahrscheinlichkeiten oder die diskrete Integralmethode. Schließlich kann eine Integration mit Monte-Carlo-Methoden durchgeführt werden. Eine detaillierte Darstellung der verschiedenen Verfahren ist zum Beispiel bei Duderstadt und Martin [20] zu finden. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wird nur die letztgenannte Methode verwendet.

2.2 Monte-Carlo-Methoden und deren Einsatz in der Transporttheorie

Die Monte-Carlo-Methode stellt ein numerisches Verfahren zur Lösung eines gegebenen Problems dar. Dabei wird ein der Fragestellung angepasstes stochastisches Modell aufgestellt und mit Hilfe von Zufallszahlen simuliert [23]. Mögliche Anwendungsfelder umfassen die Simulation stochastischer Prozesse ebenso wie deterministische Fragestellungen wie Optimierungen, Integrationen und inverse Probleme. Im deterministischen Fall werden Monte-Carlo-Methoden insbesondere bei hochdimensionalen Problemen eingesetzt, wo sie im Vergleich zu deterministischen Methoden schneller zu einer Näherungslösung führen.

Zunächst werden im folgenden Abschnitt einige Grundbegriffe der Stochastik nach Hesse [24] dargestellt. Darauf aufbauend wird die Simulation von Zufallsexperimenten mittels Pseudozufallsalgorithmen beschrieben. Im Anschluss wird auf die Berechnung von Integralen mit Monte-Carlo-Methoden eingegangen. Dabei wird insbesondere die Berechnung von Strahlungsfeldgrößen mittels Monte-Carlo-Methoden diskutiert.

2.2.1 Stochastische Grundlagen der Monte-Carlo-Methoden

Eindimensionale Zufallsexperimente

Ein wiederholbares Experiment mit zufälligem Ausgang wird als Zufallsexperiment bezeichnet. Die zu bestimmende Größe wird als Zufallsvariable X bezeichnet. Der bei einem Versuch erzielte Messwert x wird Zufallszahl oder Stichprobe der Zufallsvariable bzw. des Zufallsexperiments genannt.

Ein eindimensionales Zufallsexperiment wird durch eine Zufallsvariable X , die Menge aller möglichen Zufallszahlen $\Omega \subseteq \mathbb{R}$ und eine zugehörige Verteilungsfunktion $F(x)$,

$x \in \mathbb{R}$ charakterisiert. Je nachdem, ob Ω diskret oder kontinuierlich vorliegt, werden das Zufallsexperiment und die Zufallsvariable X als diskret oder kontinuierlich bezeichnet.

Die Verteilungsfunktion

$$F(x) \equiv P(X \leq x) = \begin{cases} \int_{-\infty}^x f(x') dx', & \text{falls } X \text{ stetig} \\ \sum_{\substack{x_i \in \Omega, \\ x_i \leq x}} P(X = x_i), & \text{falls } X \text{ diskret} \end{cases} \quad (2.37)$$

gibt die Wahrscheinlichkeit $P(X \leq x)$ an, dass eine Zufallszahl X nicht größer als x ist. Dabei bezeichnet $P(X = x_i)$ die Wahrscheinlichkeitsfunktion diskreter Elementarereignisse $x_i \in \Omega$. Die Dichtefunktion $f(x)$ stellt das kontinuierliche Analogon dar. $f(x) dx$ entspricht der Wahrscheinlichkeit, dass die Zufallsvariable X einen Messwert x auf einen infinitesimalen Bereich dx annimmt.

Der Erwartungswert einer Zufallsvariablen X wird über den Ausdruck

$$\mathbb{E}(X) \stackrel{\text{def}}{=} \int_{\Omega} x dF(x) = \begin{cases} \int_{\Omega} x \cdot f(x) dx, & \text{falls } X \text{ stetig} \\ \sum_{x_i \in \Omega} x_i \cdot P(X = x_i), & \text{falls } X \text{ diskret} \end{cases} \quad (2.38)$$

definiert. Das Integral über $dF(x)$ wird dabei als Riemann-Stieltjes-Integral bezeichnet. Der Erwartungswert existiert genau dann, wenn das Integral konvergiert.

Der Erwartungswert gibt an, welchen Wert die Zufallsvariable im Mittel über alle Realisierungen annimmt. Er hat die gleiche Einheit wie die Zufallsvariable. Ebenso wird der Erwartungswert einer transformierten Zufallsvariable $Y = \Gamma(X)$ über

$$\mathbb{E}(Y) = \mathbb{E}(\Gamma(X)) \stackrel{\text{def}}{=} \int_{\Omega} \Gamma(x) dF(x) \quad (2.39)$$

definiert. Darauf aufbauend können die i ten Momente

$$m_i \stackrel{\text{def}}{=} \mathbb{E}(X^i) = \int_{\Omega} x^i dF(x) \quad (2.40)$$

der Wahrscheinlichkeitsverteilung, sofern sie existieren, als Erwartungswerte von X^i definiert werden. Das erste Moment entspricht gerade dem Erwartungswert der Zufallsvariable. Weiterhin können die zentralen Momente $\mathbb{E}((X - \mathbb{E}(X))^i)$ angegeben werden. Insbesondere wird das zweite zentrale Moment

$$\sigma^2(X) \equiv \mathbb{V}(X) \stackrel{\text{def}}{=} \mathbb{E}((X - \mathbb{E}(X))^2) = m_2 - m_1^2 \quad (2.41)$$

als Varianz \mathbb{V} der Zufallsvariable bezeichnet und gibt die mittlere quadratische Abweichung der Zufallsvariablen vom Erwartungswert an. Die positive Wurzel aus der Varianz wird Standardabweichung

$$\sigma(X) = \sqrt{\mathbb{V}(X)} \quad (2.42)$$

der Verteilung genannt. Diese hat die gleiche Einheit wie die Zufallsvariable und wird häufig zur Angabe der Streubreite der Verteilung benutzt. Insbesondere liegen normalverteilte Zufallsvariablen mit den Wahrscheinlichkeiten

$$\begin{aligned} P(\mathbb{E}(X) - \sigma(X) \leq X \leq \mathbb{E}(X) + \sigma(X)) &\approx 68\% \\ P(\mathbb{E}(X) - 2\sigma(X) \leq X \leq \mathbb{E}(X) + 2\sigma(X)) &\approx 95\% \\ P(\mathbb{E}(X) - 3\sigma(X) \leq X \leq \mathbb{E}(X) + 3\sigma(X)) &\approx 99,7\% \end{aligned} \quad (2.43)$$

in der 1-, 2- bzw. 3 σ -Spanne um den Erwartungswert $\mathbb{E}(X)$. Das Verhältnis aus Standardabweichung und Erwartungswert

$$\mathbb{K}(X) = \frac{\sigma(X)}{\mathbb{E}(X)} \quad (2.44)$$

ist für $\mathbb{E}(X) \neq 0$ definiert und wird als Variationskoeffizient der Zufallsvariable X bezeichnet.

Mehrdimensionale Zufallsexperimente

Ein Zufallsexperiment mit einer mehrdimensionalen Zufallsvariable $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_n)$ aus einer Ergebnismenge $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ wird mit einer multivariaten Verteilungsfunktion

$$F(\mathbf{x}) = P(X_1 \leq x_1, \dots, X_n \leq x_n), \quad \mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n) \in \Omega \quad (2.45)$$

beschrieben. Die multivariate Dichtefunktion ist analog zum eindimensionalen Fall als verallgemeinerte Ableitung

$$f(\mathbf{x}) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial^n}{\partial x_1 \cdots \partial x_n} F(x_1, \dots, x_n) \quad (2.46)$$

der Verteilungsfunktion nach allen Variablen definiert. Die Definition gilt dabei in allen Punkten, in denen F differenzierbar ist.

Durch Integration dieser Dichtefunktion bezüglich einer Zufallsvariablen X_k ergibt sich mit

$$f_{\bar{k}}(x_1, \dots, x_{k-1}, x_{k+1}, \dots, x_n) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x_1, \dots, x_n) dx_k \quad (2.47)$$

die $(n - 1)$ -dimensionale Randdichte der restlichen Zufallsvariablen. Durch Integration über alle Zufallsvariablen außer X_i ergibt sich mit

$$f_i(x_i) = \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} f(x_1, \dots, x_n) dx_1 \cdots dx_{i-1} dx_{i+1} \cdots dx_n \quad (2.48)$$

die zugehörige eindimensionale Randdichte. Diese entspricht gerade der (unbedingten) Dichtefunktion der Zufallsvariablen X_i . Als Beispiel sind in Abbildung 2.2 die Dichtefunktion

$$f(x, y) = \frac{1}{5\pi} \cdot [3 \cdot \exp(-x^2 - y^2) + 2 \cdot \exp(-(x-2)^2 - (y-3)^2)] \quad (2.49)$$

sowie deren Randdichten

$$\begin{aligned} f_x(x) &= \frac{1}{5\sqrt{\pi}} \cdot [3 \cdot \exp(-x^2) + 2 \cdot \exp(-(x-2)^2)], \\ f_y(y) &= \frac{1}{5\sqrt{\pi}} \cdot [3 \cdot \exp(-y^2) + 2 \cdot \exp(-(y-3)^2)] \end{aligned} \quad (2.50)$$

dargestellt.

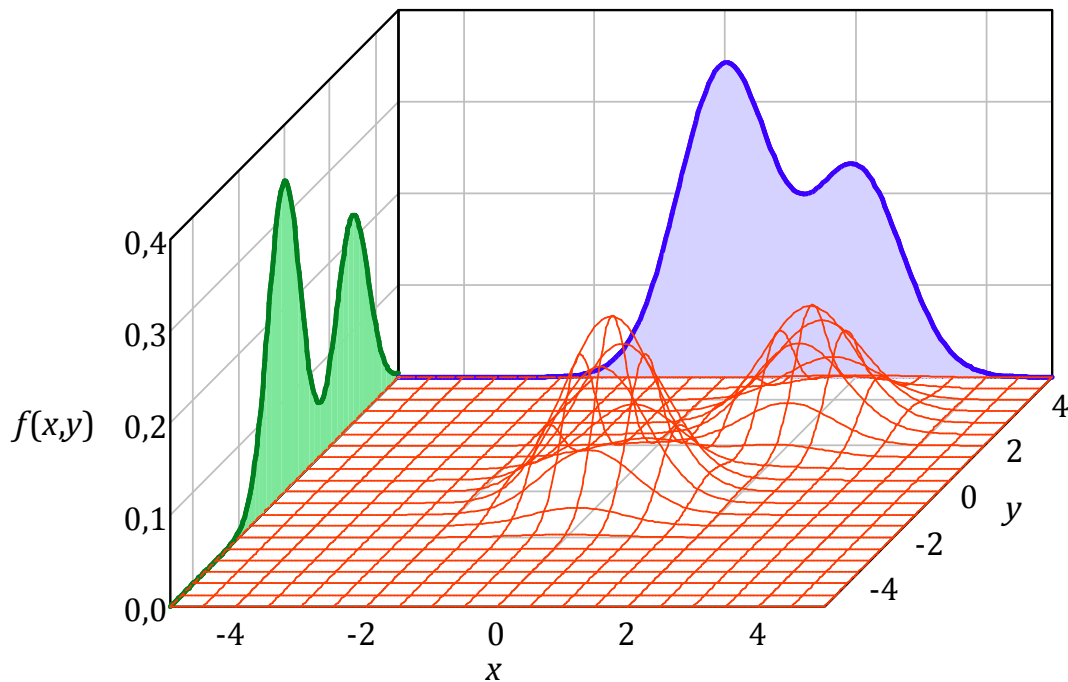


Abbildung 2.2: Zweidimensionale Dichtefunktion mit Randdichten.

Der Quotient aus der n -dimensionalen Dichtefunktion $f(\mathbf{x})$ und der $(n-1)$ -dimensionalen Randdichte $f_{\bar{k}}$ definiert die bedingte Dichtefunktion

$$f_k(x_k | x_1, \dots, x_{k-1}, x_{k+1}, \dots, x_n) = \frac{f(x_1, \dots, x_n)}{f_{\bar{k}}(x_1, \dots, x_{k-1}, x_{k+1}, \dots, x_n)} \quad (2.51)$$

der k ten Zufallsvariable. Dies entspricht der Dichtefunktion von X_k bei bekannten Realisierungen der Zufallsvariablen $X_1, \dots, X_{k-1}, X_{k+1}, \dots, X_n$. Umgekehrt lässt sich eine mehrdimensionale Dichtefunktion

$$f(\mathbf{x}) = f_{\bar{k}}(x_1, \dots, x_{k-1}, x_{k+1}, \dots, x_n) \cdot f_k(x_k | x_1, \dots, x_{k-1}, x_{k+1}, \dots, x_n) \quad (2.52)$$

jeweils in eine Randdichte und eine bedingte Dichtefunktion faktorisieren. Ist die bedingte Dichtefunktion f_k insbesondere unabhängig von den restlichen Koordinaten, so bezeichnet man X_k als unabhängig von den übrigen Zufallsvariablen. In diesem Fall lässt sich das Experiment in ein eindimensionales und ein $(n - 1)$ -dimensionales Zufallsexperiment zerlegen. In der obigen Abbildung ist dies nicht der Fall, da die Dichtefunktion (2.49) nicht faktorisiert werden kann.

Die Unabhängigkeit zweier Zufallsvariablen ist nur bei Kenntnis der gemeinsamen Wahrscheinlichkeitsverteilung oder der gemeinsamen Dichtefunktion nachweisbar. Eine lineare Abhängigkeit kann jedoch über eine Korrelation nachgewiesen werden. Ein wichtiges Beispiel bildet der Pearson'sche Korrelationskoeffizient zweier Zufallsvariablen X und Y , welcher als normierte Kovarianz $\mathbb{C}(X, Y)$ über

$$\begin{aligned} \varrho(X, Y) &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{\mathbb{C}(X, Y)}{\sigma(X)\sigma(Y)}, \text{ mit} \\ \mathbb{C}(X, Y) &\stackrel{\text{def}}{=} \mathbb{E}\left((X - \mathbb{E}(X)) \cdot (Y - \mathbb{E}(Y))\right) = \mathbb{E}(X \cdot Y) - \mathbb{E}(X) \cdot \mathbb{E}(Y) \end{aligned} \quad (2.53)$$

definiert ist. Allgemein wird für eine n -dimensionale Zufallsvariable \mathbf{X} die Korrelationsmatrix

$$R(\mathbf{X}) \stackrel{\text{def}}{=} \begin{pmatrix} \varrho(X_1, X_1) & \cdots & \varrho(X_1, X_n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \varrho(X_n, X_1) & \cdots & \varrho(X_n, X_n) \end{pmatrix} \quad (2.54)$$

definiert. Da bei unabhängigen Zufallsvariablen die gemeinsame Dichtefunktion in die eindimensionalen Randdichten faktorisiert vorliegt, ergibt sich für Kovarianz und Korrelationskoeffizient jeweils null. Aus einem von Null abweichenden Korrelationskoeffizienten folgt daher eine Abhängigkeit der Variablen. In diesem Fall werden die Zufallsvariablen als korreliert bezeichnet.

Aufgrund der Definition des Pearson'schen Korrelationskoeffizienten können nur lineare Abhängigkeiten nachgewiesen werden. Aus einem Wert von Null kann daher nicht auf Unabhängigkeit der Zufallsvariablen geschlossen werden.

2.2.2 Erzeugung von Zufallszahlen

Da Algorithmen deterministisch arbeiten, ist das Erzeugen von zufälligen Stichproben in einem Programm prinzipiell nicht möglich. Stattdessen werden Verfahren verwendet, welche nach einem deterministischen Schema pseudozufällige Werte erzeugen. Entsprechende Algorithmen heißen Pseudozufallszahlengeneratoren, oder kurz Zufallsgeneratoren. Pseudozufallszahlen zeichnet aus, dass sie sich in statistischen Tests wie echte Zufallszahlen verhalten. Beispielsweise verschwindet bei allen gängigen Zufallsgeneratoren die Korrelation aufeinander folgender Pseudozufallszahlen. Die Verwendung von deterministischen Generatoren bietet im Vergleich zu echten Zufallszahlen vor allem den Vorteil der schnellen und reproduzierbaren Generierung.

Alle gängigen Algorithmen zur Erzeugung von Pseudozufallsvariablen basieren auf Generatoren für gleichmäßig verteilte ganzzahlige Zufallszahlen. Je nach genutzter Darstellung sind diese auf $[0, 2^{32} - 1]$ oder $[0, 2^{64} - 1]$ verteilt. Durch Division mit der oberen Intervallgrenze ergibt sich näherungsweise eine konstante, stetige Dichtefunktion auf $[0, 1]$. Für diese wird der Ausdruck Standardgleichverteilung eingeführt. Deren Verteilungs- bzw. Dichtefunktion ist über

$$\begin{aligned} f(x) &= \begin{cases} 1, & 0 \leq x \leq 1 \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}, \\ F(x) &= \begin{cases} 0, & x < 0 \\ x, & 0 \leq x \leq 1 \\ 1, & x > 1 \end{cases} \end{aligned} \quad (2.55)$$

definiert. Es existieren verschiedene Verfahren zur Erzeugung standardgleichverteilter Zufallszahlen, die sich in Geschwindigkeit, Speicherbedarf und statistischen Eigenschaften unterscheiden [25]. Im Strahlungstransportprogramm AMOS wird wegen seiner Schnelligkeit der linear rückgekoppelte Schieberegistergenerator (LSFR) eingesetzt.

Die im Folgenden vorgestellten Algorithmen zur Erzeugung von Zufallsvariablen sind von Devroye [26] entnommen. Die Einteilung der Methoden ist jedoch vom Autor der vorliegenden Arbeit vorgenommen worden.

Um Zufallsvariablen gemäß beliebiger diskreter und kontinuierlicher Verteilungen zu erzeugen, bestehen im Wesentlichen zwei Möglichkeiten. Dies sind die Transformation von Zufallsvariablen und die Bestimmung von Zufallsvariablen aus Randdichten mehrdimensionaler Zufallsexperimente.

Inversionsmethode

Eine direkte Methode zur Erzeugung beliebig verteilter eindimensionaler Zufallszahlen aus gegebenen Zufallszahlen stellt die Transformation dar. Dabei wird ausgehend von einer Zufallsvariable X mit vorgegebener Verteilungsfunktion $F(x) = P(X \leq x)$ eine transformierte Zufallsvariable über die Vorschrift $Y = \Gamma(X)$ definiert. Unter der Voraussetzung, dass die Transformationsfunktion Γ invertierbar von der Menge der Zufallswerte x in die Menge der Zufallswerte y abbildet, kann die Verteilungsfunktion $G(y) = P(Y \leq y)$ über

$$G(y) = F(\Gamma^{-1}(y)) \quad (2.56)$$

berechnet werden. Damit ergibt sich im kontinuierlichen Fall für die Dichtefunktion

$$g(y) = \frac{d}{dy} G(y) = f(\Gamma^{-1}(y)) \cdot \left| \frac{d}{dy} \Gamma^{-1}(y) \right|. \quad (2.57)$$

Ist die Zufallsvariable X insbesondere standardgleichverteilt, dann können diese Ausdrücke unter Verwendung von (2.55) zu

$$G(y) = \Gamma^{-1}(y), \quad g(y) = \left| \frac{d}{dy} \Gamma^{-1}(y) \right| \quad (2.58)$$

vereinfacht werden. Durch eine geeignete Transformationsvorschrift Γ können somit aus gleichverteilten Zufallszahlen beliebig verteilte Zufallsvariablen erzielt werden. Wegen der Verwendung der inversen Verteilungsfunktion zur Transformation wird dieses Verfahren Inversionsmethode genannt. In der Praxis wird das Verfahren aufgrund der meist schwer durchführbaren Inversion jedoch nur für wenige Spezialfälle eingesetzt.

In Abbildung 2.3 ist beispielhaft die Vorgehensweise für eine fallende Dreiecksdichte

$$\begin{aligned} g(y) &= 2 \cdot (1 - y) \\ G(y) &= 2y - y^2 \Rightarrow \Gamma(x) = 1 - \sqrt{1 - x} \end{aligned} \quad (2.59)$$

dargestellt. Dabei werden standardgleichverteilte Zufallszahlen erzeugt und durch Inversion der Verteilungsfunktion in dreiecksverteilte Zufallszahlen transformiert.

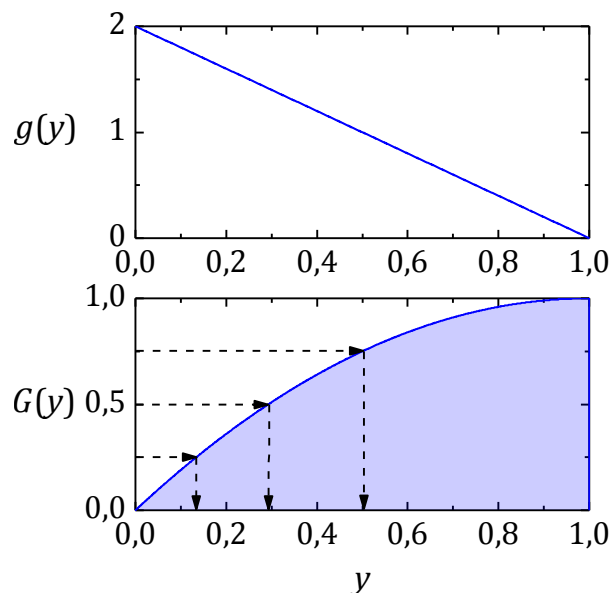


Abbildung 2.3: Dichte- und Verteilungsfunktion einer Dreiecksverteilung. Durch Anwendung der invertierten Verteilungsfunktion auf standardgleichverteilte Zufallszahlen werden dreiecksverteilte Zufallszahlen erzeugt.

Die Inversion variiert dabei die Anzahl der Zufallszahlen je Intervall, um die gewünschte Dichtefunktion zu erhalten.

Diskrete Zufallszahlen

Die Inversionsmethode bildet die Grundlage zur Erzeugung diskreter Zufallsvariablen. Für ein diskretes Zufallsexperiment mit der Verteilungsfunktion $F(x)$ und N Ereignissen x_i muss die Transformationsvorschrift

$$\Gamma(u) = \begin{cases} x_1, & \text{für } 0 \leq u < F(x_1) \\ x_i, & \text{für } F(x_{i-1}) \leq u < F(x_i) \\ x_N, & \text{für } F(x_N) \leq u \leq 1 \end{cases} \quad (2.60)$$

auf eine standardgleichverteilte Zufallszahl angewendet werden. Zum Erheben einer Zufallszahl x des diskreten Zufallsexperiments wird das Intervall $[0,1]$ in N Abschnitte unterteilt, deren Länge jeweils der diskreten Wahrscheinlichkeit $P(X = x_i)$ entspricht. Für eine standardgleichverteilte Zufallszahl u wird dann bestimmt, in welches Intervall sie gefallen ist. Dies legt das diskrete Ereignis x_i fest.

Bei diesem direkten Algorithmus müssen jedoch neben der Generierung der gleichverteilten Zufallszahl noch bis zu N Vergleiche mit den Abschnittsgrenzen durchgeführt werden. Eine sehr effiziente Umsetzung der Inversion stellt die sogenannte Alias-Methode [27] dar. Dabei wird das Intervall $[0,1]$ in N gleichgroße Bereiche unterteilt. Die diskreten Ereigniswahrscheinlichkeiten werden wie in Abbildung 2.4 so auf diese Intervalle verteilt, dass höchstens zwei Ereignisse in jedem Bereich liegen. Zur Erhebung einer Stichprobe wird eine standardgleichverteilte Zufallszahl ξ erzeugt. Durch ganzzahlige Division wird zunächst bestimmt, in welchem der N Intervalle die Stichprobe liegt. In diesem wird dann mit einem einzigen Vergleich das diskrete Ereignis festgelegt.

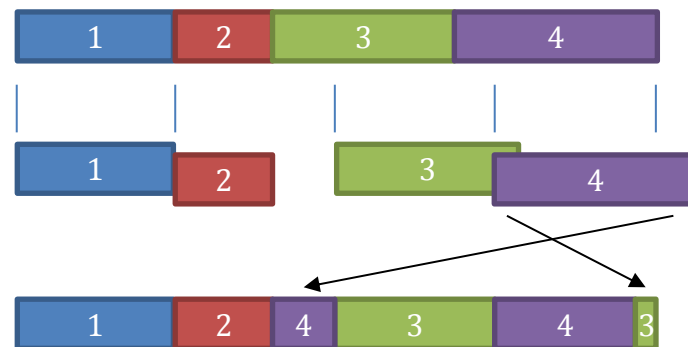


Abbildung 2.4: Oben: einfache Inversion durch Zuordnung kontinuierlicher Intervalle zu diskreten Ereignissen. Mitte und unten: Umverteilung der Intervalle in äquidistante Bereiche (blaue Striche) für Alias-Methode. In jedem Bereich liegen dabei maximal zwei diskrete Ereignisse.

Da in der binären Rechnerarithmetik Divisionen mit Potenzen von zwei besonders schnell durchgeführt werden können, wird in dieser Arbeit statt einer Unterteilung in N Bereiche die nächstgrößere Zweierpotenz 2^L mit $L = \min\{l | 2^l \geq N\}$ verwendet.

Rejektionsmethode

Von allen Methoden zur Erzeugung von kontinuierlich zufallsverteilten Stichproben aus Randdichten ist die Rejektionsmethode die bekannteste. Dabei wird die Dichtefunktion $f(x)$ auf der Ergebnismenge Ω_f als Randdichte einer kontinuierlichen zweidimensionalen Zufallsvariable modelliert, deren Dichtefunktion gleichverteilt auf der Fläche $A = \{(x, y) | x \in \Omega_f \wedge y(x) \in [0, f(x)]\}$ ist. Dieses zweidimensionale Zufallsexperiment wird durchgeführt, indem gleichverteilte Stichproben aus einer beliebigen Obermenge $O \supseteq A$ erhoben werden und alle Stichproben außerhalb von A verworfen werden.

Eine mögliche Obermenge lässt sich mithilfe eines Zufallsexperiments mit beliebiger Dichtefunktion $g(x)$ auf der Ergebnismenge Ω_f über

$$O = \{(x, y) | x \in \Omega_f \wedge y(x) \in [0, c \cdot g(x)]\}, \quad (2.61)$$

mit $c = \sup\{f(x)/g(x) | x \in \Omega_f\} \Rightarrow c \cdot g(x) \geq f(x) \forall x \in \Omega_f$

konstruieren. Als Beispiel ist für die Dreiecksverteilung aus (2.59) in Abbildung 2.5 eine Überdeckung mit standardgleichverteilter Dichtefunktion $g(x)$ dargestellt.

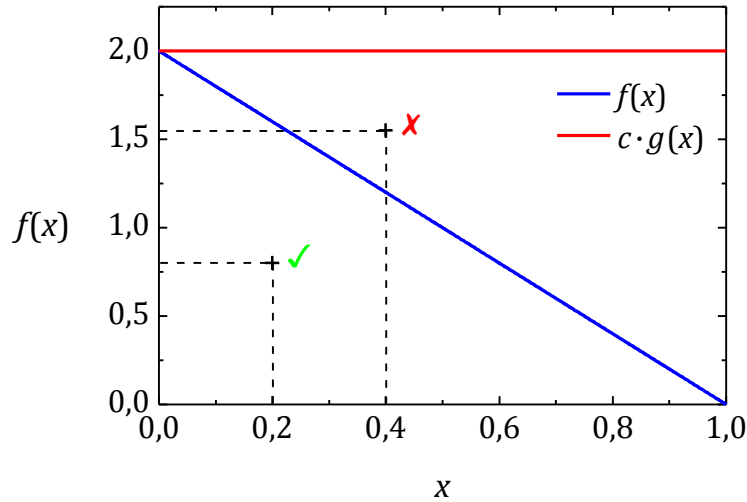


Abbildung 2.5: Rejektionsmethode am Beispiel einer Dreiecksverteilung. Die Obermenge wird über eine Gleichverteilung generiert. Stichprobenpunkte werden gleichverteilt bezüglich der Obermenge erzeugt, und deren x -Koordinate verwendet, falls der Punkt unterhalb der gewünschten Dichtefunktion liegt.

Das Zufallsexperiment wird nun in zwei Schritten durchgeführt. Zunächst werden gleichverteilte Stichproben auf der Obermenge O erzeugt, indem eine Stichprobe ξ bezüglich der Dichte $g(x)$ und eine gleichverteilte Stichprobe τ im Intervall $[0, c \cdot g(\xi)]$ erhoben wird. Diese zweidimensionale Stichprobe (ξ, τ) wird verworfen, wenn der Punkt außerhalb von A liegt, also wenn $\tau > f(\xi)$ gilt. In diesem Fall wird eine neue Stichprobe aus O erzeugt, und die Überprüfung wiederholt. Andernfalls bildet die Koordinate ξ eine Stichprobe zur Dichtefunktion $f(x)$.

Im Allgemeinen ist die Verwerfungswahrscheinlichkeit so hoch, dass die direkte Rejektionsmethode nicht effizient ist. Daher wird in moderneren Algorithmen die Dichtefunktion in Teilbereiche zerlegt, welche mit geringerer Verwerfungswahrscheinlichkeit überdeckt werden können. Die Dichtefunktion wird beispielsweise mit rechteckigen Flächenstücken überdeckt. Die Auswahl der Rechtecke erfolgt je nach Anteil an der Gesamtfläche. Durch die Zerlegung in kleinere Bereiche kann die Verwerfungswahrscheinlichkeit auf ein Minimum reduziert werden.

Eine spezielle Form dieser Methode für monotone Dichtefunktionen wurde von Marsaglia und Tsang unter dem Namen Ziggurat-Methode eingeführt [28], [29]. Dabei wird die Funktion mit flächengleichen Rechtecken horizontal überdeckt. Die Auswahl des Streifens erfolgt durch ganzzahlige Division. Durch die Monotonie der Funktion liegt ein

großer Teil der Flächen komplett unterhalb der Funktion, sodass keine Verwerfung erforderlich ist. Dies verringert neben der Verwerfungswahrscheinlichkeit auch die Aufrufhäufigkeit der Dichtefunktion.

Das Ziggurat-Verfahren wird in AMOS beispielsweise für die Erzeugung normal- und exponentialverteilter Zufallszahlen eingesetzt. Durch eine Einteilung in stückweise monotone Intervalle lassen sich damit auch Stichproben beliebiger Dichtefunktionen erzeugen. Eine entsprechende Modifikation des Algorithmus ist in AMOS zur Erzeugung von Stichproben aus Beta-Spektren implementiert worden [30]. Ein Nachteil der Methode ist die aufwendige Bestimmung der Überdeckungsbereiche als Lösung eines nichtlinearen Gleichungssystems sowie der vergleichsweise hohe Speicherbedarf von vier Gleitkommazahlen je Streifen bei einer Streifenzahl von typischerweise 128 bis 512.

Andere Randdichtemethoden

Weitere Möglichkeiten, um Zufallszahlen gemäß einer gewünschten Verteilungsfunktion zu erzeugen, ergeben sich daraus, eindimensionale Projektionen einer mehrdimensionalen Zufallsvariable zu verwenden.

Ein einfaches Beispiel ist die Rotation

$$\begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X_1 + X_2 \\ X_2 - X_1 \end{pmatrix} \quad (2.62)$$

zweier gleichverteilter Zufallsvariablen (X_1, X_2) auf $[-1,1] \times [-1,1]$ um 45° . Durch Integration ergibt sich, dass Y_1 und Y_2 zwei auf $[-1,1]$ dreiecksverteilte Zufallsvariablen mit Dichtefunktion

$$f(y) = \begin{cases} 1 - |y|, & -1 \leq y \leq 1 \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.63)$$

sind. Da Y_1 und Y_2 nicht unabhängig sind, wird meist nur eine der beiden Stichproben verwendet.

Eine weitere Variante ist die Sortierung von n unabhängigen Zufallszahlen. Dies führt zu Verteilungsfunktionen, welche Produkte der Einzelverteilungen enthalten. Insbesondere sind für das Maximum Y von n gleichverteilten Zufallsvariablen $X_i \in [0,1]$, $i = 1, \dots, n$ die Verteilungs- und Dichtefunktion über die Polynome

$$\begin{aligned} F_Y(x) &= \prod_{i=1}^n F_{X_i}(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ x^n, & 0 \leq x \leq 1 \\ 1, & x > 1 \end{cases} \\ f_Y(x) &= \begin{cases} n \cdot x^{n-1}, & 0 \leq x \leq 1 \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \end{aligned} \quad (2.64)$$

gegeben. Da die notwendige Anzahl von Zufallszahlen mit der Ordnung des Polynoms steigt, wird das Verfahren jedoch schnell ineffizient. Eine Wiederverwendung von $n - 1$ Zufallszahlen ist möglich, führt jedoch zu einer Korrelation zwischen den Stichproben.

2.2.3 Berechnung von Integralen mittels Monte-Carlo-Methoden

Ein großer Vorteil bei der Berechnung von Integralen mit Hilfe von Monte-Carlo-Methoden besteht darin, dass die Unsicherheit des Ergebnisses unabhängig von der Anzahl von Integrationsdimensionen mit $n^{-1/2}$ abnimmt, wenn n die Anzahl an Stichproben bezeichnet [23]. Im Gegensatz dazu steigt bei deterministischen Verfahren notwendige Anzahl an Stützstellen geometrisch mit der Dimensionalität.

Die Berechnung ein- oder mehrdimensionaler Integrale mit Monte-Carlo-Methoden basiert auf der Definition des Erwartungswerts nach (2.39). Wenn \mathbf{X} eine mehrdimensionale stetige Zufallsvariable mit der Verteilungsfunktion $F(\mathbf{x})$ und der Realisierungsmenge $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ ist, so lässt sich das Integral I einer Funktion $z(\mathbf{x}): \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ bezüglich F als Erwartungswert der transformierten Zufallsvariable $Z = z(\mathbf{X})$ über

$$I = \mathbb{E}(Z) = \int_{\Omega} z(\mathbf{x}) dF(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} z(\mathbf{x}) \cdot f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (2.65)$$

ausdrücken. Dabei bezeichnet $f(\mathbf{x})$ die zu \mathbf{X} gehörige mehrdimensionale Dichtefunktion.

Die Berechnung eines Integrals mit Monte-Carlo-Methoden erfolgt für n unabhängige, identisch mit der Dichte $f(\mathbf{x})$ verteilte mehrdimensionale Zufallsvariablen $\mathbf{X}_i, i = 1, \dots, n$ durch Bestimmung der transformierten Zufallszahlen $Z_i = z(\mathbf{X}_i)$. Deren Mittelwert

$$I_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n z(\mathbf{X}_i) \quad (2.66)$$

konvergiert für $n \rightarrow \infty$ nach dem starken Gesetz der großen Zahlen [31] fast sicher gegen I . Unter der Voraussetzung endlicher Varianz $\sigma_Z^2 = \mathbb{V}(z(\mathbf{X}))$ von Z ist auch die Varianz des Mittelwertes I_n

$$\sigma_n^2 = \mathbb{V}\left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n z(\mathbf{X}_i)\right) = \frac{1}{n^2} \sum_{i=1}^n \mathbb{V}(Z_i) = \frac{\sigma_Z^2}{n} \quad (2.67)$$

endlich, und geht für große Stichprobenzahlen gegen Null. Weiterhin sind in diesem Fall die I_n nach dem zentralen Grenzwertsatz für $n \rightarrow \infty$ normalverteilt [24]. Bei bekannter Varianz σ_n können daher über (2.43) näherungsweise Konfidenzintervalle des Schätzwertes I_n angegeben werden. Die geforderte Endlichkeit der Varianz σ_Z^2 gilt sicher, wenn sowohl die Menge Ω als auch deren Bildmenge $z(\Omega)$ beschränkt bleiben.

Da die Bestimmung der Varianz von Z nach (2.41) eine ebenso aufwändige Integration wie die Berechnung des Integrals I selbst erfordert, wird die korrigierte Stichprobenvarianz

$$S_Z^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (Z_i - I_n)^2 \quad (2.68)$$

als erwartungstreue Schätzfunktion der Varianz σ_Z^2 verwendet. Ein Schätzwert s_Z^2 kann direkt aus den konkreten Stichproben $z(\mathbf{x}_i)$ von Z_i berechnet werden. Die Schätzfunktion der Varianz von I_n wird nach (2.67) über

$$S_n^2 = \frac{S_Z^2}{n} \quad (2.69)$$

bestimmt.

Die verwendete Dichtefunktion f für die Integration einer Funktion $y(\mathbf{x})$ ist nach

$$I = \int_{\Omega} y(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_{\Omega} \frac{y(\mathbf{x})}{f(\mathbf{x})} \cdot f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_{\Omega} z(\mathbf{x}) dF(\mathbf{x}), \quad z(\mathbf{x}) = \frac{y(\mathbf{x})}{f(\mathbf{x})} \quad (2.70)$$

frei wählbar und muss lediglich auf dem Integrationsbereich Ω von $y(\mathbf{x})$ größer als Null sein. Die beiden folgenden Grenzfälle sind dabei aufgrund ihrer Anschaulichkeit von besonderer Bedeutung.

Grenzfall konstanter Wertefunktion

Ein besonders anschaulicher Algorithmus ergibt sich mit der Dichtefunktion

$$f_0(\mathbf{x}) = \frac{y(\mathbf{x})}{I}, \quad (2.71)$$

bei welcher die Wertefunktion $z_0(\mathbf{x}) = I$ konstant ist. Da das Integral I a priori nicht bekannt ist, wird dieses Verfahren in Kombination mit der in Abschnitt 2.2.2 vorgestellten Rejektionsmethode eingesetzt. Dabei werden auf einer Obermenge O des Volumens unter der Kurve $A = \Omega \times [0, y(\mathbf{x})]$ gleichverteilte Stichproben erhoben, und immer dann ein Beitrag mit dem Volumen der Obermenge V_O saldiert, wenn die Stichprobe in A liegt. Das Verfahren entspricht einer geometrischen Bestimmung des Volumens unter der Funktion $y(\mathbf{x})$. Die Beiträge zum Integral sind dabei Bernoulli-verteilt mit dem Parameter P . Die (unbekannte) Wahrscheinlichkeit

$$P = \frac{I}{V_O} \quad (2.72)$$

des positiven Ereignisses entspricht gerade dem Anteil des zu integrierenden Volumens I zum Volumen der Obermenge.

Ein klassisches Beispiel für die Anwendung dieser Methode ist die Bestimmung der Kreiszahl π durch Berechnung der Fläche eines Viertelkreises. In diesem Fall sind die Parameter zu

$$\begin{aligned} y(x) &= \sqrt{1 - x^2}, & x \in \Omega &= [0,1] \\ I &= \pi/4 \\ O &= [0,1] \times [0,1], & V_O &= 1 \end{aligned} \quad (2.73)$$

bestimmt. Wie in Abbildung 2.6 dargestellt, werden auf der Obermenge O gleichverteilte zweidimensionale Zufallsvariablen mit den Koordinaten (X_i, Y_i) erhoben. Die Zufallsvariable liegt innerhalb des Kreisbogens $y(x)$, wenn

$$X_i \leq y(X_i) \Leftrightarrow X_i^2 + Y_i^2 < 1 \quad (2.74)$$

gilt. In diesem Fall ergibt sich ein Beitrag $Z = 1$, andernfalls $Z = 0$.

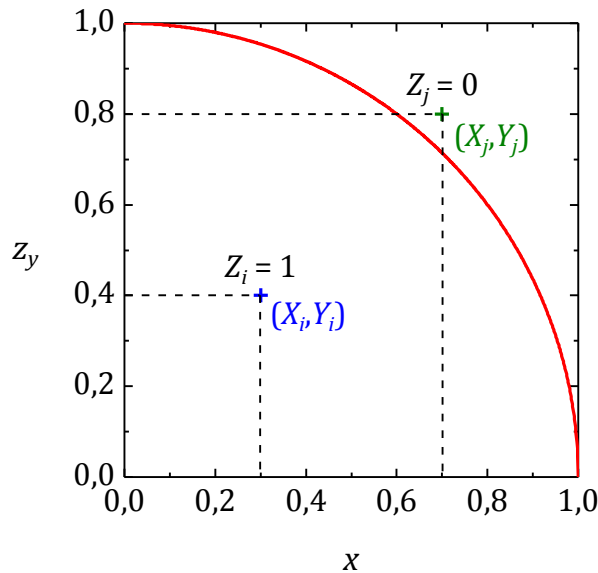


Abbildung 2.6: Bestimmung der Kreiszahl über konstante Wertefunktion. Zufallspunkte innerhalb des Viertelkreises tragen mit Gewicht Eins, Punkte außerhalb mit Gewicht 0 zum Schätzwert bei.

Der Schätzwert I_n der Z_i nimmt gemäß Binomialverteilung einen Erwartungswert und eine Varianz von

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(I_n) &= P = \frac{\pi}{4}, \\ \sigma^2(I_n) &= \frac{1}{n} \cdot P \cdot (1 - P) = \frac{3\pi^2}{16n} \approx \frac{1,85}{n} \end{aligned} \quad (2.75)$$

an.

Grenzfall konstanter Dichtefunktion

Eine weitere intuitive Methode ergibt sich durch die Verwendung einer auf Ω gleichverteilten Dichtefunktion $f(x)$. Dabei ist nach (2.70) die Wertefunktion

$$\begin{aligned} z_y(x) &= c \cdot y(x), \\ c &= \int_{\Omega} dx \end{aligned} \quad (2.76)$$

bis auf einen Normierungsfaktor c gleich der zu integrierenden Funktion $y(x)$. Zur Integration werden im gesamten Integrationsbereich Ω gleichmäßig Stichproben X_i

erhoben, und der Wert der Funktion $z_y(\mathbf{X}_i)$ an diesen Stichproben summiert. Dies stellt das stochastische Analogon zu einer deterministischen Integration über die Mittelpunktregel [32] dar.

In diesem Fall nimmt die Wertefunktion nach (2.73) den Wert

$$z_y(x) = y(x) = \sqrt{1 - x^2}, \quad \text{mit } c = \int_{\Omega} dx = 1 \quad (2.77)$$

an. Die Verfahrensweise ist in Abbildung 2.7 dargestellt. Es werden gleichverteilte Zufallsvariablen X_i auf $[0,1]$ erzeugt. Der Beitrag einer Zufallsvariable beträgt jeweils $z_y(X_i)$.

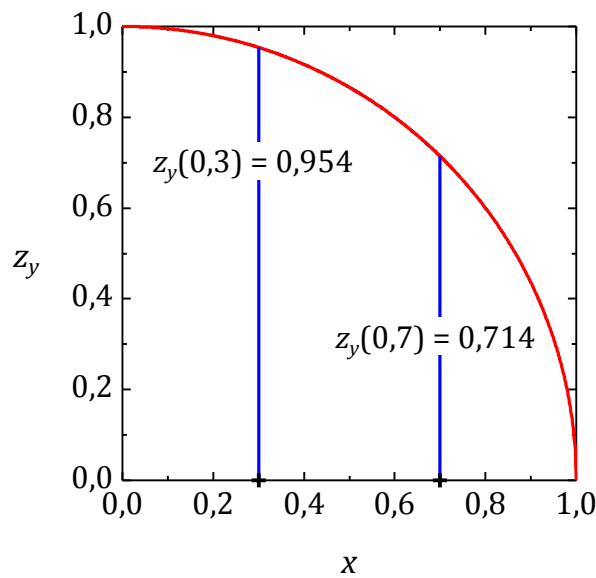


Abbildung 2.7: Bestimmung der Kreiszahl π über konstante Dichtefunktion. Zu jeder Zufallszahl x_i wird das jeweilige Gewicht z_y saldiert.

Die Dichtefunktion der $Z_i = z_y(X_i)$ ist nach (2.58) über

$$g(z) = \frac{z}{\sqrt{1 - z^2}} \quad (2.78)$$

gegeben. Daraus können Erwartungswert und Varianz von I_n zu

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(I_n) &= \mathbb{E}(Z) = \frac{\pi}{4} \\ \sigma^2(I_n) &= \frac{1}{n} \cdot \mathbb{V}(Z) = \frac{32 - 3\pi^2}{48n} \approx \frac{0,05}{n} \end{aligned} \quad (2.79)$$

bestimmt werden. Im Vergleich zur Verwerfungsmethode ergibt sich eine deutlich geringere Varianz. Dies folgt aus der Tatsache, dass die Höhe der Funktion analytisch verwendet wird, anstatt diese durch Verwerfung zu schätzen. Außerdem ist das Verfahren weniger aufwendig, da die Erzeugung der zweiten Zufallszahl für die Verwerfung entfällt.

Leistungszahl einer Monte-Carlo-Schätzfunktion

Obwohl die Dichte keinen Einfluss auf den Erwartungswert der Schätzfunktion besitzt, verändert sie den Wert der Varianz σ_Z^2 und kann damit die Unsicherheit des Schätzwertes bei gleichem Rechenaufwand signifikant verringern. So ist die Varianz des vorgestellten Verwerfungsverfahrens in jedem Fall mindestens ebenso groß wie die Varianz des Verfahrens mit Gewichtsfunktion $z_y(\mathbf{x})$. Für die Wahl einer geeigneten Dichtefunktion existieren sogenannte varianzreduzierende Verfahren [23]. Diese müssen individuell auf jedes Problem angepasst werden.

Um verschiedene Simulationen bezüglich ihres Rechenaufwands zu vergleichen, wird die sogenannte Leistungszahl¹ über

$$\eta_n \stackrel{\text{def}}{=} \frac{I_n^2}{S_n^2 \cdot T_n} \quad (2.80)$$

definiert [4]. Dabei bezeichnet T_n die Zufallsvariable der zur Berechnung von n Stichproben benötigten Rechenzeit. Im Grenzwert großen Stichprobenumfangs n nähert sich η_n dem konstanten Grenzwert

$$\eta = \frac{1}{\frac{\sigma_Z^2}{I^2} \cdot \mathbb{E}(T_1)} = \frac{1}{\mathbb{K}^2(Z) \cdot \mathbb{E}(T_1)}. \quad (2.81)$$

Nach (2.44) ist die Leistungszahl damit näherungsweise invers proportional zum Quadrat des Variationskoeffizienten $\mathbb{K}(Z)$ der Zufallsvariablen Z sowie zum Erwartungswert der Rechenzeit für eine Stichprobe $\mathbb{E}(T_1)$. Eine höhere Leistungszahl entspricht einer schnelleren Konvergenz der Simulation.

Ein varianzreduzierendes Verfahren modifiziert die Dichtefunktion $z(\mathbf{x})$ und damit den Variationskoeffizienten $\mathbb{K}(Z)$. Ein solches Verfahren wird als effizient bezeichnet, wenn die Leistungszahl zunimmt. Eine Verringerung des Variationskoeffizienten darf also die Rechenzeit nur geringfügig erhöhen.

2.2.4 Monte-Carlo-Strahlungstransportrechnungen

Wie im vorigen Abschnitt dargestellt, ermöglicht die Monte-Carlo-Methode die Bestimmung von Erwartungswerten bezüglich vorgegebener Dichtefunktionen. Im Kontext des Strahlungstransports bedeutet dies, dass genau solche Größen I mit Monte-Carlo-Methoden berechnet werden können, welche sich als gewichtetes Integral der fundamentalen Strahlungsfeldgrößen $\chi_{E\Omega}$ oder $\zeta_{E\Omega}$ darstellen lassen. In Bezug auf die Stoßrattendichte $\zeta_{E\Omega}$ weisen diese die Form

$$I = \int \int \int \int z(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t) \cdot \zeta_{E\Omega}(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t) d\Omega dE dV dt \quad (2.82)$$

¹ engl.: figure of merit (FOM)

auf. Dabei stellt $z(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t)$ eine Schätzfunktion (oder auch Schätzer) bezüglich der gewünschten Messgröße dar. Schätzfunktionen bezüglich der Stoßratendichte werden als Stoßpunktschätzer bezeichnet.

Um eine Monte-Carlo-Integration über Ausdruck (2.82) durchzuführen, müssen Stichproben aus der Stoßratendichte $\zeta_{E\Omega}$ erhoben werden. Dazu wird die Reihenentwicklung nach der Stoßordnung (2.33) verwendet. Der schematische Ablauf der Berechnung ist in Abbildung 2.8 dargestellt (basierend auf [33]).

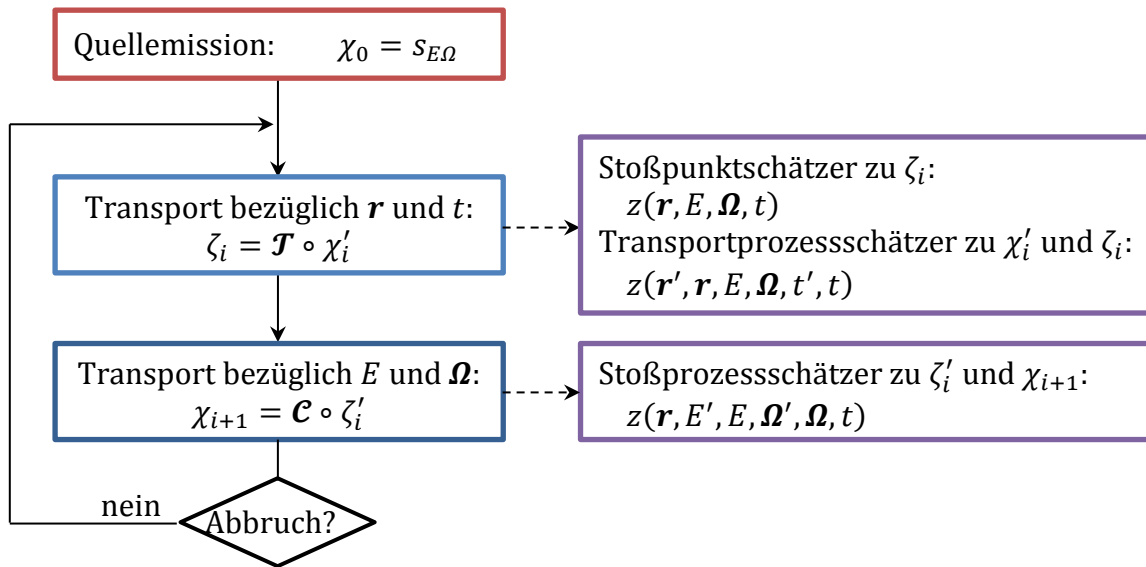


Abbildung 2.8: Schematischer Ablauf einer Monte-Carlo-Strahlungstransportrechnung mit verschiedenen Typen von Schätzfunktionen.

Zunächst wird nach (2.34) eine Stichprobe der Erstemissionsratendichte $\chi_0 = s_{E\Omega}$ erzeugt. Stichproben der Stoßratendichten und Emissionsratendichte beliebiger Ordnung können anhand der Rekursionsvorschrift (2.35) und (2.36) erhalten werden. Dazu wird aus einer Stichprobe der Emissionsratendichte i ter Ordnung χ_i eine Stichprobe des Transportintegrals (2.35) erzeugt. Dieses lässt sich mit einem inhomogenen Poisson-Prozess mit einer Reaktionsrate je Wegelement von $\Sigma_t(\mathbf{r}, E)$ modellieren. Das Ergebnis ist eine Stichprobe der Stoßratendichte i ter Ordnung ζ_i . Zu dieser wird eine Stichprobe des Stoßintegrals (2.36) über Art und Anzahl der bei einer Wechselwirkung emittierten Ergebnisteilchen erhoben. Das Ergebnis ist schließlich eine Stichprobe der Emissionsratendichte $(i + 1)$ ter Ordnung χ_{i+1} . Die Iteration wird bis zu vorgegebenen Abbruchkriterien wiederholt.

Für Stoßpunktschätzer erfolgt die Schätzung der Messgröße I über Summation von Beiträgen des Gewichts $z(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t)$ zu jeder Stoßratenstichprobe $\zeta_i(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t)$. Der Messwert ist daher über

$$I = \sum_i I_i = \sum_i \int \int \int \int z(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t) \cdot \zeta_i(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t) d\Omega dE dV dt \quad (2.83)$$

gegeben. Als wichtiges Beispiel lässt sich die über ein Volumen V und ein Zeitintervall Δt gemittelte Flussdichte φ nach (2.31) über die Schätzfunktion

$$m(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t) = \frac{\Lambda(\mathbf{r}, E)}{V \cdot \Delta t}, \quad (2.84)$$

ausdrücken. Die spektrale Flussdichte φ_E lässt sich entsprechend bestimmen, indem die Integration bezüglich der Energie E auf verschiedene Intervalle aufgeteilt wird. Das Ergebnis ist eine Liste von mittleren Flussdichten je Energieintervall.

Daneben existieren sogenannte Prozessschätzer, welche die Änderung der Phasenraumdichte jeweils vor und nach einem Transport- oder Stoßprozesse berücksichtigen. Der sogenannte Spurlängenschätzer zur Bestimmung der Flussdichte als Alternative zum Stoßpunktschätzer ist ein weit verbreitetes Beispiel eines Transportprozessschätzers. Er berücksichtigt die Tatsache, dass die Flussdichte gemittelt über ein Volumen V und ein Zeitintervall Δt nach Gleichung (2.11) der Länge von Teilchenspuren geteilt durch das Volumen und das Zeitintervall entspricht. Der Algorithmus saldiert daher die Längen der Transportstrecken innerhalb eines Volumens je Zeitintervall. Schnittpunkte der Teilchenspur mit der Oberfläche werden dabei als zusätzlicher Transportschritt ohne nachfolgenden Stoß aufgefasst.

Im Vergleich mit dem Stoßpunktschätzer besitzt der Spurlängenschätzer eine geringere Varianz, da er bei einer vorgegebenen Teilchenspur immer die korrekte Spurlänge bestimmt. Das Produkt aus Stoßratendichte und mittlerer freie Weglänge liefert hingegen nur im Mittel über unendlich viele Wiederholungen den wahren Wert.

Wie im letzten Abschnitt erwähnt, kann die Monte-Carlo-Integration statt mit den Strahlungsfeldgrößen $\chi_{E\Omega}$ und $\zeta_{E\Omega}$ bei entsprechend angepasster Schätzfunktion auch mit beliebig anderen Dichtefunktionen auf dem Phasenraum durchgeführt werden. Die Verwendung der Emissions- und Stoßratendichte besitzt jedoch eine besondere physikalische Bedeutung, da sich der zugrundeliegende stochastische Prozess mit iterativer Bestimmung höherer Stoßordnungen analog dem physikalischen Transport eines Neutrons über alle Wechselwirkungsorte von der Quellemission bis zur Absorption modellieren lässt. Die Verwendung dieses speziellen stochastischen Prozesses wird als analoge Simulation des Strahlungstransports bezeichnet. Bei nichtanalogen Verfahren verschwindet die Übereinstimmung zwischen Stichprobe und Teilchen, sodass nur noch die Erwartungswerte eine physikalische Bedeutung haben [34].

2.2.5 Vorhandene Strahlungstransportprogramme

Es existiert eine große Zahl an Strahlungstransportprogramme für die Simulation von Neutronen. Hier sollen nur die Wichtigsten vorgestellt werden. Für den allgemeinen Strahlungstransport von Photonen, Neutronen und geladenen Teilchen werden nach McKinney [35] international die Programmpakete MCNP [4], PHITS [7], GEANT [8] und FLUKA [5] aktiv entwickelt und betreut. Die nicht aufgezählten Programme werden nach Wissensstand des Autors entweder nicht mehr entwickelt oder sind nur für einge-

schränkte Teilchenarten oder Anwendungszwecke konzipiert. Aufgrund der Bedeutung im Bereich Neutronentransport wird hier noch das Programm TART [9] vorgestellt.

Von allen Monte-Carlo-Strahlungstransportprogrammen besitzt MCNP² nach McKinney [35] die größte Verbreitung. Es ermöglicht die Simulation von Photonen, Neutronen und Elektronen. Für den Neutronentransport bis 20 MeV werden detaillierte linear interpolierte Wirkungsquerschnittsdaten im ACE³-Format [4] auf Basis von ENDF-Bibliotheken verwendet. Neben stationären können zeitabhängige Probleme, z.B. für Flugzeitsimulationen, sowie Kritikalitätsberechnungen für spaltbare Materialien behandelt werden. Es existiert eine parallel entwickelte Version MCNP-X, welche zusätzlich für den Transport von hochenergetischen Teilchen und Ionen eingesetzt werden kann. Es ist geplant, beide Versionen in der kommenden Version 6 wieder zusammenzuführen [36].

PHITS⁴ ist ein jüngeres Strahlungstransportprogramm der japanischen Atomenergiebehörde, welches ähnlich wie MCNP(-X) für einen weiten Anwendungsbereich konzipiert ist. Neutronenquerschnitte bis 20 MeV werden wie bei MCNP im ACE-Format verwendet [7]. Neben der klassischen Monte-Carlo-Integration wird zusätzlich ein sogenannter Event-Generator-Modus angeboten, bei der ein vollständig zur Natur analoger Transport mit kontinuierlicher Energie- und Impulserhaltung durchgeführt wird [7].

GEANT⁵ wird am CERN für die Simulation von Hochenergieexperimenten entwickelt. Im niederenergetischen Energiebereich bis mindestens 20 MeV bietet es für den Neutronentransport eine Simulation basierend auf speziell aufbereiteten ENDF-Daten an. Insbesondere im Bereich langsamer Neutronen werden die Ergebnisse in der Literatur jedoch als noch nicht zuverlässig bewertet [37], [38].

Alle drei Programme zeichnen sich durch eine hohe Präzision der eingesetzten Wechselwirkungsdaten aus. Die notwendigerweise großen Datenmengen führen jedoch wegen des häufigeren Speicherzugriffs und der notwendigen Interpolation zu einer größeren Rechenzeit. Außerdem sorgen die bei Neutronen stark schwankenden Querschnitte im Resonanzbereich für eine hohe Varianz im Energiespektrum und damit für eine langsame Konvergenz der Simulation.

TART ist ein reines Photonen-Neutronen-Transportprogramm, welches insbesondere mit seiner hohen Rechengeschwindigkeit wirbt [9]. Das Programm verwendet dabei gruppengemittelte Wirkungsquerschnitte mit 50 Gruppen je Dekade auf Basis von ENDF/B-VI.8. Durch einen speziellen Transportalgorithmus wird sichergestellt, dass die Selbstabschirmung innerhalb einer Energiegruppe mit hoher Genauigkeit reproduziert wird [39]. Im Gegensatz zu den meisten anderen Programmen wird nur eine analoge Simulation angeboten. Obwohl dies normalerweise einen guten Kompromiss darstellt, kann es insbesondere bei Problemen mit dicken Abschirmungen oder kleinen Detektoren eine langsamere Konvergenz zur Folge haben.

² General Monte Carlo N-Particle Transport Code

³ A Compact ENDF

⁴ Particle and Heavy Ion Transport Code System

⁵ Geometry and Tracking; frz. geant: Riese, Gigant

FLUKA⁶ ist ein seit längerer Zeit am CERN entwickeltes Strahlungstransportprogramm [5], [40]. Der Schwerpunkt liegt auf der Simulation hochenergetischer Teilchenkaskaden. Der Neutronentransport wird vereinfacht über einen Multigruppenalgorithmus mit 260 Gruppen simuliert. Dabei wird die kontinuierliche Neutronenenergie durch eine diskrete Energiegruppe ersetzt. Richtungs dichtefunktionen werden durch wenige diskrete Stützstellen dargestellt. Dadurch können Energie- und Richtungsänderungen bei einer Streuung durch diskrete Übergangswahrscheinlichkeiten beschrieben werden.

Beide Programme verwenden reduzierte und vereinheitlichte Wechselwirkungsdaten, wodurch ein deutlicher Geschwindigkeitsvorteil erreicht werden kann. Auf der anderen Seite führt die geringe Auflösung der Daten zu einer groben Energieauflösung und zu einer stark vereinfachten Modellierung der Wechselwirkungsprozesse.

Auch alle anderen dem Autor bekannten Neutronentransportprogramme verwenden entweder linear interpolierte Wirkungsquerschnitte mit voller Genauigkeit oder Gruppenstrukturen mit maximal 50 Gruppen je Dekade.

2.3 Wechselwirkungen von Neutronen

Zur Berechnung des Stoßintegrals (2.36) ist eine genaue Kenntnis der möglichen Wechselwirkungsprozesse von Neutronen mit Materie nötig. Diese sind in komplizierter Weise vom Material und der Neutronenenergie abhängig. Der relevante Energiebereich der Neutronen wird dabei grob in vier Intervalle eingeteilt [41]:

$$\begin{array}{ll}
 E < 0,5 \text{ eV} & \text{langsame Neutronen} \\
 0,5 \text{ eV} \leq E < 10 \text{ keV} & \text{intermediäre Neutronen} \\
 10 \text{ keV} \leq E < 20 \text{ MeV} & \text{schnelle Neutronen} \\
 E \geq 20 \text{ MeV} & \text{hochenergetische Neutronen}
 \end{array} \tag{2.85}$$

Für den Strahlungstransport sind nur Wechselwirkungen zwischen Neutronen n und Atomkernen A relevant. Dabei können verschiedene Prozesse konkurrierend auftreten [42]:

$$A + n \rightarrow \begin{cases} A + n & \text{elastische Streuung} \\ A' + n & \text{inelastische Streuung (A' angeregt)} \\ B + b + \dots & \text{eigentliche Kernreaktion} \end{cases} \tag{2.86}$$

Bei Streuprozessen verbleibt der Kern im Grundzustand A oder einem angeregten Zustand A' . In Kernreaktionen im engeren Sinne entsteht ein anderer Atomkern B sowie ein oder mehrere leichtere Teilchen b . In der Kernphysik wird für die Beschreibung einer Reaktion meist die verkürzte Schreibweise $A(n, b)B$ oder auch $A(n, b)$ verwendet. Insbesondere wird inelastische Streuung auch mit $A(n, n')$ bezeichnet.

Wechselwirkungen zwischen Neutronen und Kernen lassen sich gemäß (2.86) in Streuprozesse und Kernreaktionen unterteilen. Je nachdem, ob bei einer Streuung der

⁶ **Fluktuierende Kaskaden**

Kern angeregt wird oder nicht, wird von inelastischer oder elastischer Streuung gesprochen. Einen Sonderfall bildet die Streuung von langsamen Neutronen mit einer kinetischen Energie unter 10 eV. Bei den meisten Kernen ist aufgrund der geringen Energie keine inelastische Streuung möglich. Dafür spielt jedoch die chemische Bindung des Atoms eine Rolle. Insbesondere bei kondensierter Materie wird daher die elastische Streuung in eine vollelastische und eine unelastische Komponente aufgeteilt.

Bei einer vollelastischen Streuung an einem chemisch gebundenen Atomkern wird keine Energie an den Kern übertragen, sondern nur die Richtung des Neutrons verändert. In einer unelastischen Streuung findet eine Energieübertragung zu kollektiven Anregungen der chemisch gebundenen Atome statt. Dabei kann sowohl eine Energieabgabe als auch eine Aufnahme durch thermisch angeregte Eigenschwingungen auftreten. In diesem Zusammenhang wird bei Neutronen im Gleichgewicht mit Materialien einer bestimmten Temperatur auch von thermischen Neutronen gesprochen.

Kernreaktionen im engeren Sinne führen zu einer Veränderung des Atomkerns. Im Sinne des Neutronentransports ist weiterhin eine Unterscheidung nach der Anzahl frei werdender Neutronen sinnvoll. Werden wie etwa bei (n,p)-, (n, α)- oder (n, γ)-Reaktionen keine Neutronen freigesetzt, wird von Absorptionsreaktionen gesprochen. Alle Kernreaktionen mit Neutronenfreisetzung, wie beispielsweise (n,np) oder (n,2n), werden im Folgenden als Komplexreaktionen bezeichnet.

Im Folgenden werden die verschiedenen Wechselwirkungsprozesse von Neutronen mit Atomkernen vorgestellt. Dabei wird vor allem die für den Transport notwendige Reaktionskinematik hergeleitet. Die quantitative Beschreibung der Wechselwirkungen erfolgt mithilfe differentieller Wirkungsquerschnitte, welche aus Experimenten und Modellrechnungen bestimmt werden können.

2.3.1 Elastische und inelastische Streuung

Neutronenstreuungen ohne Veränderung des Kerns stellen bis etwa 10 MeV die häufigste Wechselwirkungsart dar. Da es sich um Zweiteilchenreaktionen handelt, besteht aufgrund von Energie- und Impulserhaltung ein eindeutiger Zusammenhang zwischen polarem Streuwinkel θ und Neutronenenergie nach der Streuung E' .

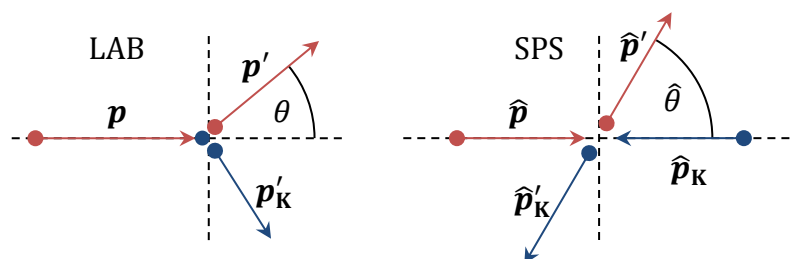


Abbildung 2.9: Neutronenstreuung im Labor- und Schwerpunktsystem.

Für die Betrachtung von Streuungen sind zwei Inertialsysteme besonders ausgezeichnet. Eines ist das Laborsystem (LAB), in welchem der Atomkern vor der Reaktion ruht. Dies entspricht dem Bezugssystem des Neutronentransports in ruhenden Medien. Das

andere ist das Schwerpunktsystem (SPS), in welchem der Gesamtimpuls von Neutron und Kern verschwindet. In diesem System vereinfachen sich aufgrund der Symmetrie bezüglich Projektil und Target die kinematischen Beziehungen. Eine schematische Darstellung des Streuprozesses in beiden Inertialsystemen ist in Abbildung 2.1 dargestellt.

In evaluierten Datenbibliotheken, welche in dieser Arbeit als Quelle der verwendeten Wechselwirkungsdaten verwendet werden, sind die Richtungsichten für Streuprozesse stets im Schwerpunktsystem gegeben. Im Folgenden wird daher die für den Transport notwendige Transformation ins Laborsystem relativistisch hergeleitet.

Es gilt folgende Nomenklatur:

$$\begin{aligned} x & \text{ GröÙe im LAB vor der Streuung} \\ x' & \text{ GröÙe im LAB nach der Streuung} \\ \hat{x} & \text{ GröÙe im SPS vor der Streuung} \\ \hat{x}' & \text{ GröÙe im SPS nach der Streuung} \end{aligned} \quad (2.87)$$

Die Ruheenergie eines Teilchens wird dabei mit E_0 , die Ruhemasse mit m_0 , die kinetische Energie mit E , der Impuls mit p und die Gesamtenergie mit W bezeichnet, sodass die relativistischen Zusammenhänge

$$\begin{aligned} E_0 &= m_0 c^2 \\ W &= E_0 + E, \\ W^2 &= E_0^2 + p^2 c^2 \end{aligned} \quad (2.88)$$

gelten. Dabei bezeichnet c die Vakuumlichtgeschwindigkeit. Die Ruheenergie des Neutrons wird insbesondere mit E_0^n gekennzeichnet. Für den Quotient aus Kernruhemasse m_0^K und Neutronenruhemasse m_0^n wird das Formelzeichen

$$\alpha = \frac{m_0^K}{m_0^n} = \frac{E_0^K}{E_0^n} \quad (2.89)$$

verwendet. Der sogenannte Q -Wert

$$Q = \sum_{\text{vor}} E_0^{(i)} - \sum_{\text{nach}} E_0^{(i)} \quad (2.90)$$

bezeichnet das Energieäquivalent $E_0^{(i)}$ der Massendifferenz zwischen allen Teilchen i vor und nach dem Stoß [42]. Ein positiver Q -Wert entspricht einer exothermen Reaktion. Der Energiegewinn verteilt sich auf die Bewegungsenergie der Reaktionsprodukte. Der Q -Wert einer inelastischen Streuung

$$Q = -E_{\text{ex}} \quad (2.91)$$

entspricht gerade der negativen Anregungsenergie E_{ex} des Kerns. Der Bezug zwischen Labor- und Schwerpunktsystem ist durch die Schwerpunktgeschwindigkeit vor dem

Stoß v_s gegeben. Bei ruhendem Atomkern bestimmt sich diese aus dem Verhältnis zwischen Neutronenimpuls p und der relativistischen Gesamtmasse m_s vor dem Stoß. Es gilt

$$v_s = \frac{p}{m_s},$$

$$\beta_s \stackrel{\text{def}}{=} \frac{v_s}{c} = \frac{p \cdot c}{m_s \cdot c^2} = \frac{\sqrt{(E_0^n + E)^2 - (E_0^n)^2}}{(E_0^n + E) + \alpha \cdot E_0^n} = \frac{\sqrt{2 \cdot \epsilon + \epsilon^2}}{(\alpha + 1) + \epsilon}, \quad (2.92)$$

wobei $\epsilon = E/E_0^n$ das Verhältnis der kinetischen Energie des Neutrons vor dem Stoß zu seiner Ruheenergie angibt. Der Koeffizient der relativistischen Transformation γ_s wird über

$$\gamma_s = \frac{1}{\sqrt{1 - \beta_s^2}} = \frac{(\alpha + 1) + \epsilon}{\sqrt{(\alpha + 1)^2 + 2 \cdot \alpha \cdot \epsilon}} \quad (2.93)$$

bestimmt. Mittels Lorentz-Transformation aus dem Laborsystem ergeben sich die transformierte Gesamtenergie des Neutrons \widehat{W} und des Kerns \widehat{W}_K im Schwerpunktsystem zu

$$\begin{aligned} \widehat{W} &= \gamma_s \cdot (W - \beta_s \cdot p \cdot c) = \gamma_s \cdot \left(E_0^n + E - \beta_s \cdot \sqrt{(E_0^n + E)^2 - (E_0^n)^2} \right) \\ &= \frac{(\alpha + 1) \cdot E_0^n + \alpha \cdot E}{\sqrt{(\alpha + 1)^2 + 2 \cdot \alpha \cdot \epsilon}}, \end{aligned} \quad (2.94)$$

$$\widehat{W}_K = \gamma_s \cdot \alpha \cdot E_0^n.$$

Aufgrund der Impulserhaltung im Schwerpunktsystem sind der Impuls des Kerns \hat{p}'_K und des Neutrons \hat{p}' nach der Streuung gleich. Mit $p^2 c^2 = W^2 - E_0^2$ aus (2.88) ergibt sich der folgende Zusammenhang

$$\begin{aligned} \hat{p}' &= \hat{p}'_K \\ \rightarrow \widehat{W}'^2 - (E_0^n)^2 &= \widehat{W}_K'^2 - (\alpha \cdot E_0^n - Q)^2 \\ \rightarrow \widehat{W}_K'^2 &= \widehat{W}'^2 - (E_0^n)^2 + (\alpha \cdot E_0^n - Q)^2 \end{aligned} \quad (2.95)$$

zwischen den Gesamtenergien des Neutrons \widehat{W}' und des Kerns \widehat{W}_K' nach der Streuung. Dabei wird berücksichtigt, dass die Ruheenergie des Kerns nach der Streuung um $E_{\text{ex}} = -Q$ zunimmt. Die Rückstoßenergie des Kerns $\widehat{W}_K'^2$ kann mithilfe der Energieerhaltung im Schwerpunktsystem

$$\begin{aligned} \widehat{W} + \widehat{W}_K &= \widehat{W}' + \widehat{W}_K' \\ \rightarrow (\widehat{W} + \widehat{W}_K - \widehat{W}')^2 &= \widehat{W}_K'^2. \end{aligned} \quad (2.96)$$

ausgedrückt werden. Somit ergibt sich die Energie des gestreuten Neutrons im Schwerpunktsystem zu

$$\begin{aligned}
\widehat{W}' &= \frac{(\widehat{W} + \widehat{W}_K)^2 + (E_0^n)^2 - (\alpha \cdot E_0^n - Q)^2}{2 \cdot (\widehat{W} + \widehat{W}_K)} \\
&= \frac{(\alpha + 1) \cdot E_0^n + \alpha \cdot E + \left(\alpha - \frac{q}{2}\right) \cdot Q}{\sqrt{(\alpha + 1)^2 + 2 \cdot \alpha \cdot \epsilon}},
\end{aligned} \tag{2.97}$$

mit $q = Q/E_0^n$. Der Schwellwert der Reaktion im Laborsystem E_t wird dadurch bestimmt, dass die Gesamtenergie des Neutrons \widehat{W}' nach der Reaktion im Schwerpunktsystem genau dessen Ruheenergie E_0^n entspricht:

$$\begin{aligned}
\widehat{W}'(E_t) &\stackrel{\text{def}}{=} E_0^n \\
\rightarrow E_t &= -\left(\frac{\alpha + 1}{\alpha} - \frac{q}{2 \cdot \alpha}\right) \cdot Q
\end{aligned} \tag{2.98}$$

Eine Rücktransformation von (2.97) ins Laborsystem erlaubt die Bestimmung der Sekundärenergie des Neutrons

$$\begin{aligned}
E' = W' - E_0^n &= \gamma_s \cdot \left(\widehat{W}' + \beta_s \cdot \sqrt{\widehat{W}'^2 - E_0^2} \cdot \hat{\mu} \right) - E_0^n \\
&= \frac{(\alpha^2 + 1 + \alpha\epsilon) \cdot E + (\alpha + 1 + \epsilon) \left(\alpha - \frac{q}{2}\right) \cdot Q}{(\alpha + 1)^2 + 2\alpha\epsilon} \\
&\quad + \frac{(2 + \epsilon) \cdot \alpha E}{(\alpha + 1)^2 + 2\alpha\epsilon} \sqrt{\left(1 + \frac{\left(\alpha - 1 - \frac{q}{2}\right) \cdot q}{2 \cdot \alpha \cdot \left(1 + \frac{\epsilon}{2}\right)}\right) \left(1 - \frac{E_t}{E}\right) \cdot \hat{\mu}}
\end{aligned} \tag{2.99}$$

in Abhängigkeit der Primärenergie E , des Q -Werts und des Richtungskosinus bezüglich des Neutronenimpulses vor und nach dem Stoß im Schwerpunktsystem $\hat{\mu}$. Die so erhaltene Formel ermöglicht eine lineare Transformation vom Richtungskosinus des Streuwinkels im Schwerpunktsystem $\hat{\mu}$ in die Sekundärenergie im Laborsystem E' . Der Ausdruck für klassische Mechanik ergibt sich aus dem obigen durch den Grenzübergang $\epsilon, q \rightarrow 0$.

Der zugehörige Richtungskosinus im Laborsystem μ kann nun aus Energieerhaltung

$$\begin{aligned}
W + W_K &= W' + W'_K \\
\rightarrow [E_0 + E] + [\alpha \cdot E_0] &= [E_0 + E'] + [\alpha \cdot E_0 - Q + E'_R]
\end{aligned} \tag{2.100}$$

und Impulserhaltung

$$\begin{aligned}
p_K'^2 &= p^2 + p'^2 - 2 \cdot p \cdot p' \cdot \mu \\
\rightarrow [W_K'^2 - (\alpha \cdot E_0^n - Q)^2] & \\
&= [W^2 - (E_0^n)^2] + [W'^2 - (E_0^n)^2] - 2 \\
&\quad \cdot \sqrt{[W^2 - (E_0^n)^2][W'^2 - (E_0^n)^2]} \cdot \mu
\end{aligned} \tag{2.101}$$

berechnet werden. Umstellen und Einsetzen von (2.100) in (2.101) ergibt den Richtungskosinus

$$\mu = \frac{(\alpha + 1 + \epsilon) \cdot E' - (\alpha - 1) \cdot E - \left(\alpha - \frac{q}{2}\right) \cdot Q}{2 \cdot \sqrt{\left(1 + \frac{\epsilon}{2}\right) \cdot \left(1 + \frac{\epsilon'}{2}\right) \cdot E \cdot E'}} \quad (2.102)$$

in Abhängigkeit der Sekundärenergie. Der Grenzübergang zum klassischen Ergebnis erfolgt wieder über $\epsilon, \epsilon', q \rightarrow 0$.

2.3.2 Thermische Neutronenstreuung

Während geladene Teilchen bei Energien von einigen Kiloelektronenvolt innerhalb weniger Mikrometer kondensierter Materie absorbiert werden und Photonen dieser Energie mittlere freie Weglängen unterhalb eines Millimeters aufweisen, werden Neutronen selbst in stark absorbierenden Materialien bis auf wenige Hundert Millielektronenvolt abgebremst, bevor die mittlere freie Weglänge einen Millimeter unterschreitet. In diesem Energiebereich ist die Eigenbewegung der Kerne nicht vernachlässigbar. Je nach Energie und Richtung des Kerns kann statt einer Abbremsung auch eine Energieaufnahme stattfinden. Da die Wechselwirkung nicht an einem ruhenden Kern stattfindet, sind die eben vorgestellten kinematischen Zusammenhänge nicht anwendbar.

Bei niedriger Stoßenergie ist auch die chemische Bindung des Atoms nicht mehr vernachlässigbar. So kann ein gebundenes Atom solche Energie- und Impulsüberträge besonders wahrscheinlich aufnehmen, welche zu einer bestimmten Anregung der Bindung führen. Weiterhin ist die de-Broglie-Wellenlänge des Neutrons bei diesen Energien in der Größenordnung der Bindungsabstände der Atome. Daher tritt zusätzlich zur Streuung am einzelnen Atom eine Beugung ohne Energieverlust an regelmäßigen Strukturen wie Molekülen oder Atomgittern auf. Da diese von der Ausrichtung der Struktur abhängt, welche fast immer unbekannt ist, können nur über alle Orientierungen gemittelte Querschnitte angegeben werden. Selbst die Bestimmung dieser mittleren Querschnitte ist jedoch sehr aufwändig. Daher werden nur für besonders wichtige Materialien evaluierte Daten für die thermische Streuung bereitgestellt. Eine detaillierte Beschreibung der zugrundeliegenden Streumodelle wird in Abschnitt 3.1 gegeben.

Um den Transport von langsamen Neutronen modellieren zu können, wird bei allen anderen Materialien angenommen, dass sich die Atomkerne wie ein freies Gas mit Maxwell-verteilten Geschwindigkeiten $\mathbf{v}_R = (v_{R,1}, v_{R,2}, v_{R,3})^T$ mit der Dichte

$$f(v_{R,1}, v_{R,2}, v_{R,3}) = \left(\frac{m_0^n}{2\pi k_B T}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot \exp\left(-\frac{m_0^n}{2k_B T} \cdot (v_{R,1}^2 + v_{R,2}^2 + v_{R,3}^2)\right) \quad (2.103)$$

verhalten. Die Transformation zwischen Labor- und Schwerpunktsystem kann aufgrund der niedrigen Energien über die klassische Galilei-Transformation erfolgen. Für die Berücksichtigung der Kernbewegung ist dabei die Darstellung bezüglich der vektoriellen Geschwindigkeiten \mathbf{v} und \mathbf{v}_K von Neutron und Kern mit

$$\mathbf{v}_s = \frac{\alpha \cdot \mathbf{v}_K + \mathbf{v}}{\alpha + 1} \quad (2.104)$$

$$\hat{\mathbf{v}} = \mathbf{v} - \mathbf{v}_s, \quad \mathbf{v}' = \hat{\mathbf{v}}' + \mathbf{v}_s \quad (2.105)$$

$$E' = \frac{m_0^n}{2} v'^2 \quad (2.106)$$

vorteilhaft. Im Vergleich der freien Gas-Näherung mit den wenigen bekannten gebundenen Nuklidquerschnitten zeigt sich jedoch, dass diese Näherung den elastischen Streuquerschnitt um ein bis zwei Größenordnungen überschätzt (vgl. Abschnitt 3.1.4).

2.3.3 Kernreaktionen

Neben der Streuung des Neutrons können auch Kernreaktionen auftreten, bei denen der nukleare Aufbau des Targetkerns verändert wird. Je nach Nuklid und Neutronenenergie können dabei ganz unterschiedliche Reaktionen stattfinden. Außer an Tritium und Helium-4 ist für alle praktisch relevanten Nuklide ein sogenannter Neutroneneinfang (n, γ) mit positivem Q -Wert möglich. Dabei wird das Neutron vom Kern absorbiert. Die Anregungsenergie wird über eine Kaskade von Photonen und Konversionselektronen abgegeben. Bei allen anderen Kernreaktionen entsteht neben dem Produktkern noch mindestens ein weiteres Fragment. Diese Fragmente sind meist leichte Kerne wie Protonen und Alphateilchen sowie Neutronen.

Da bei Komplexreaktionen wie (n, np) , $(n, n\alpha)$ oder $(n, 2n)$ neben dem Produktkern und einem Neutron mindestens ein weiteres Teilchen als Reaktionsprodukt entstehen, besteht im Gegensatz zur Neutronenstreuung kein eindeutiger Zusammenhang zwischen Streuwinkel und Neutronenenergie. Stattdessen muss der erreichbare Energie- und Winkelbereich über doppelt-differentielle Wirkungsquerschnitte beschrieben werden.

Für viele Nuklide und Reaktionen sind die zugehörigen Energie-Richtungsdichten $d_{E\mu}(E, \hat{E}', \hat{\mu})$ im Schwerpunktsystem angegeben. Für eine Strahlungstransportrechnung werden die Daten jedoch im Laborsystem benötigt. Mit den Koeffizienten aus (2.92) und (2.93) können die Zusammenhänge

$$\begin{aligned} \hat{E}'(E', \mu) &= \gamma_s \cdot (W' - \beta_s \cdot \mathbf{p}' \cdot \mathbf{c} \cdot \mu) - E_0 \\ &= \gamma_s \cdot \left(E_0 + E' - \beta_s \cdot \sqrt{E' \cdot (2E_0 + E')} \cdot \mu \right) - E_0 \\ &= \frac{\beta_s^2 \gamma_s^2}{1 + \gamma_s} E_0 + \gamma_s E' - \beta_s \gamma_s \cdot \sqrt{E' \cdot (2E_0 + E')} \cdot \mu, \end{aligned} \quad (2.107)$$

$$\begin{aligned} \hat{\mu}(E', \mu) &= \frac{\hat{\mathbf{p}}' \cdot \hat{\mu}}{\hat{p}'} = \frac{\gamma_s \cdot (\mathbf{p}' \cdot \mathbf{c} \cdot \mu - \beta_s \cdot W')}{\hat{p}'} \\ &= \frac{\gamma_s \cdot \left(\sqrt{E' \cdot (2E_0 + E')} \cdot \mu - \beta_s \cdot (E' + E_0) \right)}{\sqrt{\hat{E}' \cdot (2E_0 + \hat{E}')}} \end{aligned} \quad (2.108)$$

hergeleitet werden. Zur Bestimmung der Dichtefunktion im Laborsystem wird daraus die Funktionaldeterminante der Transformation zu

$$\det \frac{\partial(\hat{E}', \hat{\mu})}{\partial(E', \mu)} = \begin{vmatrix} \frac{\partial \hat{E}'}{\partial E'} & \frac{\partial \hat{E}'}{\partial \mu} \\ \frac{\partial \hat{\mu}}{\partial E'} & \frac{\partial \hat{\mu}}{\partial \mu} \end{vmatrix} = \sqrt{\frac{E' \cdot (2E_0 + E')}{\hat{E}' \cdot (2E_0 + \hat{E}')}} \quad (2.109)$$

bestimmt. Bei kritischen Energie- und Winkelkoordinaten

$$\begin{aligned} E'_{\text{kr}} &= \gamma_s \cdot (\hat{W}' + \beta_s \hat{p}' c \hat{\mu}) - E_0 = (\gamma_s - 1)E_0 = \frac{\beta_s^2 \gamma_s^2}{1 + \gamma_s} E_0, \\ \mu_{\text{kr}} &= \frac{\gamma_s \cdot (\hat{p}' c \hat{\mu} + \beta_s \hat{W}')}{\sqrt{E'_{\text{kr}} \cdot (2E_0 + E'_{\text{kr}})}} = 1, \end{aligned} \quad (2.110)$$

für welche im Schwerpunktsystem die kinetische Energie \hat{E}' gerade verschwindet, tritt eine Polstelle der Funktionaldeterminante auf. Physikalisch bedeutet dies, dass ein Neutron, unabhängig vom Streuwinkel im Schwerpunktsystem, im Laborsystem in Vorwärtsrichtung mit der Schwerpunktgeschwindigkeit emittiert wird. In der Energie-Richtungsdichte im Laborsystem tritt die Polstelle nicht auf, solange die Dichtefunktion im Schwerpunktsystem für $\hat{E}' \rightarrow 0$ schneller als mit $\sqrt{\hat{E}'}$ gegen Null geht.

3 Praktische Umsetzung des Strahlungstransportalgorithmus

In diesem Abschnitt der Arbeit wird der entwickelte Transportalgorithmus sowie die dazu notwendigen Algorithmen und Datenparametrisierungen vorgestellt. Zunächst wird in Abschnitt 3.1 auf die zugrundeliegenden Wechselwirkungsdaten im ENDF-Format sowie deren Auswertung eingegangen.

In Abschnitt 3.2 wird die entworfene Aufbereitung der Daten für den Strahlungstransport vorgestellt. Da Wirkungsquerschnitte von Neutronen sehr detailliert und umfangreich vorliegen, wird zunächst eine gemeinsame Datenstruktur erarbeitet, bezüglich der die ursprünglich vorliegenden evaluierten Daten aufbereitet werden. Einen wichtigen Schritt bildet die gemeinsame Verarbeitung mehrerer Nukliddaten zu einem makroskopischen Material. Dabei werden die mittlere freie Weglänge des Materials sowie Reaktionswahrscheinlichkeiten der einzelnen Nuklide bestimmt. Für die Aufbereitung selbst wird ein Programm erstellt, welches die Auswertung evaluierter Wechselwirkungsdaten im ENDF-Format ermöglicht und daraus gruppengemittelte Wirkungsquerschnitte und linear interpolierte Energie-Richtungsichten erzeugt.

In Abschnitt 3.3 wird schließlich das Strahlungstransportprogramm AMOS vorgestellt und der dafür entwickelte Neutronentransportalgorithmus sowie dessen programmtechnische Umsetzung erläutert. Zum Erheben von Stichproben aus linear interpolierten Dichtefunktionen wird die neu entworfene stochastische Trapezmethode dargestellt. Weiterhin wird ein neuer Algorithmus diskutiert, welcher eine schnelle Zuordnung der Neutronenenergie zur aktuellen Energiegruppe ermöglicht.

3.1 Evaluierte Wechselwirkungsdaten

Aufgrund der Wichtigkeit von nuklearen Wechselwirkungen unter anderem in der Kernenergietechnik, der Radionuklidproduktion und für den Strahlenschutz werden von verschiedenen internationalen Forschungseinrichtungen evaluierte Wechselwirkungsdaten in einem einheitlichen Format zur Verfügung gestellt. Die Evaluationen werden durch die Kombination von experimentellen Ergebnissen mit Modellrechnungen zusammengestellt. Durch regelmäßige Benchmarks wird sichergestellt, dass die Daten so gut wie möglich den aktuellen Kenntnisstand der Wechselwirkungsdaten wiedergeben.

Neutronen tragen in typischen Anwendungen über mehr als zehn Größenordnungen im Energiebereich von Milli- bis Megaelektronenvolt zum Transport bei und weisen starke Variationen des Wirkungsquerschnitts um mehr als eine Größenordnung in einem schmalen Energiebereich auf. Die Energieabhängigkeit des Wirkungsquerschnitts wird insbesondere durch die Kernstruktur bestimmt, sodass anders als bei Elektronen oder Photonen Wirkungsquerschnitte für alle Nuklide eines chemischen Elements separat angegeben werden müssen. Dies führt dazu, dass Neutronendatenbanken im Vergleich mit evaluierten Datenbibliotheken von Photonen oder Elektronen sehr umfangreich sind. Einige wichtige Datenbibliotheken für universellen Einsatz sowie die herausgebenden Institutionen sind in Tabelle 3.1 zusammengestellt. Außerdem ist jeweils die Anzahl von Nukliden angegeben, zu denen Neutronendaten vorhanden sind [43], [44].

	Institution	Nuklide mit Neutronendaten
CENDL-3.1	China Nuclear Data Center	240
ENDF/B-VII.1	National Nuclear Data Center (USA)	393
JEFF-3.1.2	NEA Data Bank (weltweit)	381
JENDL-4.0	JAEA Nuclear Data Center (Japan)	406
RUSFOND-2010	A. I. Leipunsky Institute of Physics and Power Engineering (Russland)	686
TENDL-2011	Nuclear Research and Consultancy Group	2425

Tabelle 3.1: Übersicht der wichtigsten Bibliotheken evaluierter Wechselwirkungsdaten. Ebenfalls angegeben ist die Anzahl von Nukliden, zu denen Neutronendaten vorhanden sind.

Neben den genannten existiert eine Vielzahl von Bibliotheken für Spezialanwendungen. Diese enthalten beispielsweise detaillierte Daten zu Aktivierungsreaktionen oder Kernspaltungsprozessen. Es fehlen jedoch Angaben zu differentiellen Wirkungsquerschnitten, sodass sie für Strahlungstransportrechnungen nicht verwendbar sind.

Eine evaluierte Datenbibliothek ist in Unterbibliotheken für jedes einfallendes Teilchen eingeteilt. In jeder Unterbibliothek existiert pro Nuklid eine Datei im zugrunde liegenden ENDF-6 Datenformat. Die kernphysikalischen Größen wie Wirkungsquerschnitt, Richtungsichten, Energie-Richtungsichten und radioaktive Umwandlungen sind darin in separaten Abschnitten (Files) zusammengestellt.

Diese sind jeweils in Unterabschnitte (Tapes) je Reaktion unterteilt. Die Daten werden über eine analytische Parametrisierung oder in Form einer konstant oder linear interpolierbaren Tabelle dargestellt. Die lineare Interpolation ist jeweils für lineare oder logarithmische Abszissen- und Ordinatoreinteilung möglich. Differentielle Wirkungsquerschnitte können im Labor- oder Schwerpunktsystem gegeben werden.

Im Folgenden wird kurz die Darstellung der Wechselwirkungsdaten in ENDF-Dateien vorgestellt. Für eine detaillierte Beschreibung wird auf das offizielle ENDF-Handbuch [45] verwiesen.

3.1.1 Wirkungsquerschnitte

In modernen Evaluationen werden Wirkungsquerschnitte als Summe eines tabellierten Untergrundquerschnitts und parametrisierter Resonanzfunktionen dargestellt. Die Resonanzparameter sind dabei in Abschnitt 2, der Untergrund in Abschnitt 3 der ENDF-Datei gegeben. Um kontinuierlich tabellierte Querschnitte für Raumtemperatur zu erhalten, müssen die Resonanzen zum einen mit genügender Genauigkeit in den Querschnitt eingefügt werden und zum anderen ihre thermische Verbreiterung sowie die thermische Überhöhung des elastischen Querschnitts für die gewünschte Materialtemperatur bestimmt werden.

Da dies aufgrund der großen Anzahl von Resonanzen und der Vielzahl ihrer Parametrisierungsformen sehr aufwendig ist, wird stattdessen auf Daten zugegriffen, welche bereits mit dem Programm NJOY [15] vorverarbeitet worden sind. Solche Daten werden für viele Evaluationen zusätzlich zu den Originaldatensätzen angeboten. Speziell für diese Arbeit werden die mit dem Programm JANIS 3.0 mitgelieferten ENDF-Dateien verwendet [46]. Diese sind mit NJOY für eine graphische Darstellung vorbereitet worden.

In Abbildung 3.1 ist beispielhaft die Darstellung des totalen Wirkungsquerschnitts von Aluminium über Resonanzparameter und Untergrundquerschnitt dargestellt. In diesem Fall beginnt der Untergrundquerschnitt erst ab etwa 800 keV.

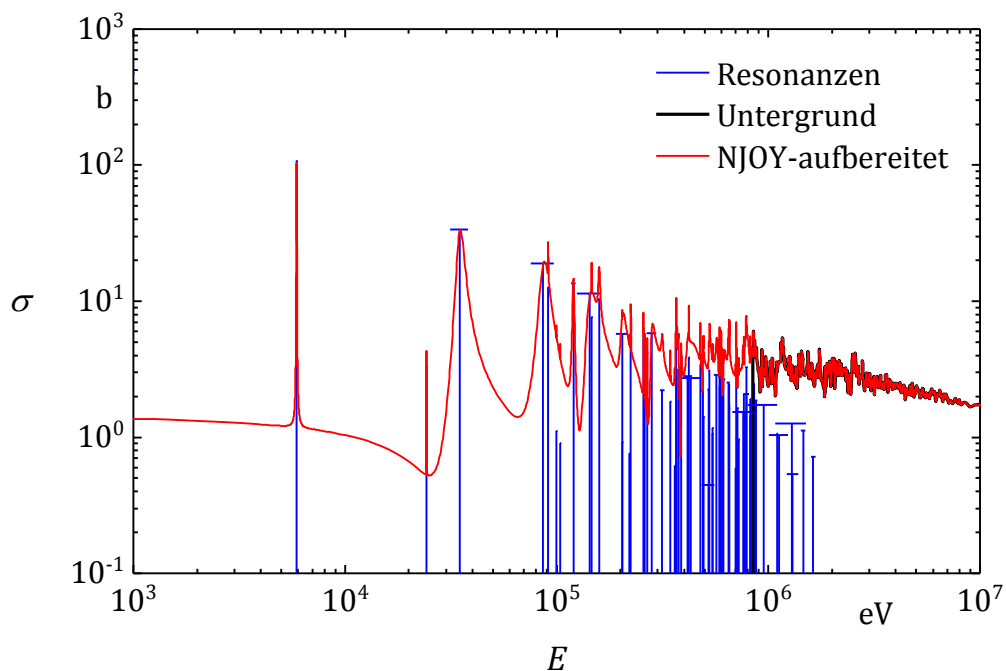


Abbildung 3.1: Totaler Wirkungsquerschnitt von Aluminium in Resonanzen (blau) und Untergrund (schwarz) nach ENDF/B-VII.1 sowie zugehöriger NJOY-prozessierter Querschnitt (rot).

Der ENDF-Standard unterscheidet etwa 50 verschiedene Reaktionstypen. Zusätzlich können für Reaktionen mit nur einem leichten Fragment und angeregtem Kern Wirkungsquerschnitte für bis zu 40 Anregungszustände angegeben werden. Dies betrifft (n, n') , (n, p') , (n, d') , (n, t') , $(n, {}^3\text{He}')$ und (n, α') .

3.1.2 Richtungsichten

In Abschnitt 4 der ENDF-Datei werden Richtungsichten von Sekundärteilchen gegeben. Dies wird vor allem für solche Reaktionen genutzt, bei denen die Energie der Teilchen wie bei diskreten Abregungsenergien bekannt ist oder wie bei elastischer und inelastischer Streuung aus der Kinematik berechnet werden kann. In wenigen Fällen, bei denen keine Korrelation zwischen Energie und Richtung der Teilchen vorhanden oder bekannt

ist, wird die Energie-Richtungsdichte ebenfalls als getrennte Energie- und Richtungs-dichte gegeben.

Für elastische und inelastische Streuung lässt sich die Energie-Richtungsdichte nach den kinematischen Zusammenhängen (2.99) und (2.102) mittels

$$d_{E\Omega}(E, E', \mu) = \frac{1}{m(E)} \cdot f(E, \hat{\mu}(E')) \cdot \delta(\mu - \mu'(E')), \quad (3.1)$$

$$E'(\hat{\mu}) = m(E) \cdot \hat{\mu} + n(E)$$

darstellen. Dabei bezeichnet $\delta(x)$ die Dirac'sche Deltadistribution. $m(E)$ und $n(E)$ sind primärenergieabhängige Transformationsparameter. Die Energie des gestreuten Neutrons wird also zunächst aus einer Stichprobe des Richtungskosinus der Streuung im Schwerpunktsystem bestimmt. Der zugehörige Richtungskosinus im Laborsystem wird dann über den kinematischen Zusammenhang (2.102) berechnet.

Richtungsdichten können entweder in Form einer Datentabelle mit Interpolationsvorschrift oder als Liste von Legendre-Koeffizienten gegeben sein. Tabellierte Richtungsdichten werden meist mit einer linearen Interpolationsvorschrift angegeben. Es besteht aber auch die Möglichkeit einer Histogramminterpolation oder einer logarithmischen Interpolation bezüglich y . Mit den Stützpunkten (x_i, y_i) , $i = 1, \dots, N$ und der Bedingung $x_i \leq \hat{\mu} < x_{i+1}$ werden alternativ die Parametrisierungen

Histogramm:

$$f(E, \hat{\mu}) = y_i$$

linear:

$$f(E, \hat{\mu}) = \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i} \cdot (x - x_i) + y_i \quad (3.2)$$

linear-logarithmisch:

$$f(E, \hat{\mu}) = \exp\left(\frac{\ln y_{i+1} - \ln y_i}{x_{i+1} - x_i} \cdot (x - x_i) + \ln y_i\right)$$

verwendet. In Abbildung 3.2 ist beispielhaft die linear tabellierte Richtungsdichte der elastischen Streuung an ${}^9\text{Be}$ für $E = 1,65 \text{ MeV}$ aus der JEFF-3.1-Datenbank dargestellt. Hier werden nur wenige angepasste Stützstellen zur Darstellung verwendet. Für andere Materialien wie beispielsweise Aluminium ist die Dichtefunktion auf 101 äquidistanten Stützstellen gegeben.

Bezüglich der Primärenergie E ist häufig eine lineare Interpolation vorgegeben. Da die Richtungskosinusstützstellen benachbarter tabellierter Dichtefunktionen nicht übereinstimmen müssen, besitzt die interpolierte Funktion die $\hat{\mu}$ -Stützstellen beider Funktionen. Entlang dieser Stützstellen wird dann bezüglich der Energie interpoliert.

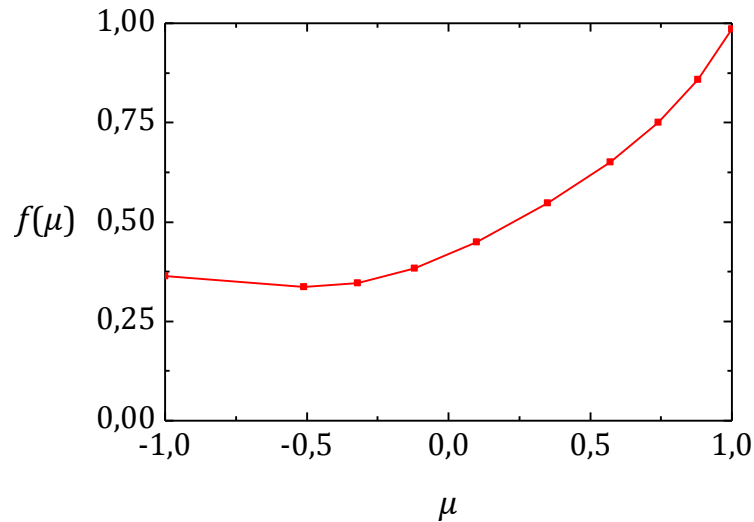


Abbildung 3.2: Richtungsichte von Beryllium für elastische Streuung von Neutronen mit 1,65 MeV Primärenergie.

In Legendre-Darstellung wird die Dichtefunktion

$$f(E, \hat{\mu}) = \sum_{l=0}^L b_l(E) \cdot P_l(\hat{\mu}) \quad (3.3)$$

über die Koeffizienten b_l der l ten Legendrepolynome $P_l(\hat{\mu})$ charakterisiert. Dabei bezeichnet L die maximale Legendre-Ordnung der Darstellung. Diese ist in ENDF auf 64 beschränkt. In den wenigsten Fällen werden mehr als 20 Polynomordnungen angegeben.

Eine Legendredarstellung der Richtungsichte für die elastische Streuung von Neutronen mit $E = 6$ MeV an Kohlenstoff nach JEFF-3.1 ist in Abbildung 3.3 dargestellt.

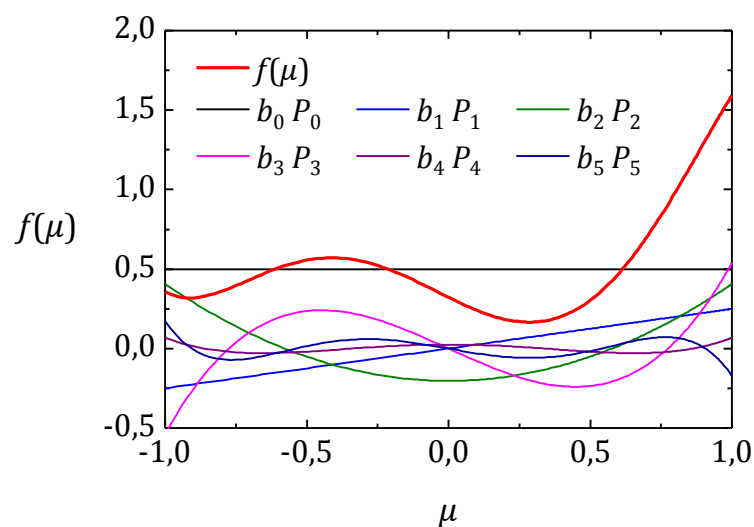


Abbildung 3.3: Richtungsichte von Kohlenstoff für elastische Streuung von Neutronen mit 6 MeV Primärenergie.

In der ENDF-Datei wird statt des Koeffizienten b_l der Wert $a_l = 2b_l/(2l + 1)$ gespeichert. Dieser gibt nach

$$a_l = \frac{2}{2l + 1} b_l = \int_{-1}^1 f(E, \hat{\mu}) \cdot P_l(\hat{\mu}) d\hat{\mu} \quad (3.4)$$

gerade das Skalarprodukt aus Legendrepolynom und Dichtefunktion an. Der Faktor $2/(2l + 1)$ entspricht dabei der \mathbb{L}^2 -Norm des l ten Legendre-Polynoms [47].

Da die Legendre-Entwicklung linear in den Koeffizienten ist, können diese direkt bezüglich der Energie interpoliert werden, anstatt die resultierenden Dichtefunktionen zu interpolieren.

3.1.3 Energie-Richtungsichten

Zur Beschreibung von Komplexreaktionen mit mehr als zwei Reaktionsprodukten werden im Allgemeinen Energie-Richtungsichten verwendet. Die entsprechenden zweidimensionalen Dichtefunktionen werden in Abschnitt 6 der ENDF-Datei angegeben. Die Dichten können bezüglich Sekundärenergie und Richtung im Labor- oder Schwerpunktsystem gegeben sein.

Die Angabe der zweidimensionalen Dichtefunktion

$$d_{E\Omega}(E, E', \mu) = f(E, E') \cdot g(E, \mu|E') \quad (3.5)$$

erfolgt faktorisiert in eine tabelliert gegebene Sekundärenergiedichte $f(E, E')$ und bedingte Richtungsichten $g(E, \mu|E')$. Sowohl f als auch g werden bezüglich der Sekundärenergie E' zwischen gemeinsamen Stützstellen E'_i interpoliert. Die Interpolation kann konstant, linear, linear-logarithmisch, logarithmisch-linear oder doppelt-logarithmisch erfolgen. Die ersten drei Fälle sind bereits in (3.2) für die Richtungsichte dargestellt. Für logarithmisch-lineare und doppelt-logarithmische Interpolation gelten die folgenden Ausdrücke:

logarithmisch-linear:

$$f(E, \mu) = \frac{y_{i+1} - y_i}{\ln x_{i+1} - \ln x_i} \cdot (\ln x - \ln x_i) + y_i \quad (3.6)$$

doppelt-logarithmisch:

$$f(E, \mu) = \exp \left(\frac{\ln y_{i+1} - \ln y_i}{\ln x_{i+1} - \ln x_i} \cdot (\ln x - \ln x_i) + \ln y_i \right)$$

Die bedingten Richtungsichten für gegebene Sekundärenergie E'_i können bezüglich des Richtungskosinus μ tabelliert, als Legendre-Entwicklung oder in Form einer Kalbach-Mann-Darstellung angegeben werden.

Die Kalbach-Mann-Darstellung beschreibt die Energie-Richtungsichte im Schwerpunktsystem mit nur zwei Parametern je Sekundärenergie und wird deshalb häufig eingesetzt. Die Richtungsichte

$$\begin{aligned}
g(E, \hat{\mu} | \hat{E}') &= \frac{a(E, \hat{E}')}{2 \sinh a(E, \hat{E}')} \\
&\cdot [\cosh(a(E, \hat{E}') \hat{\mu}) + r(E, \hat{E}') \sinh(a(E, \hat{E}') \hat{\mu})]
\end{aligned} \tag{3.7}$$

wird dabei als Summe der hyperbolischen Sinus- und Kosinusfunktion dargestellt. Der Wert von $r(E, \hat{E}')$ bestimmt den Anteil der antisymmetrischen hyperbolischen Sinusfunktion. Der Parameter $a(E, \hat{E}')$ legt die Krümmung der Dichtefunktion im Ursprung fest. Er muss nicht explizit angegeben werden, sondern kann aus einem empirischen Ausdruck berechnet werden. Für die Berechnungsvorschrift wird auf das ENDF-Handbuch [45] verwiesen.

Beispielhaft ist in Abbildung 3.4 die Energie-Richtungsichte der $^{14}\text{N}(n, 2n)$ -Reaktion für 14 MeV Neutronen aus der JEFF-3.1-Bibliothek dargestellt. Bezüglich der Sekundärenergie wird die Kalbach-Mann-Darstellung histogramminterpoliert.

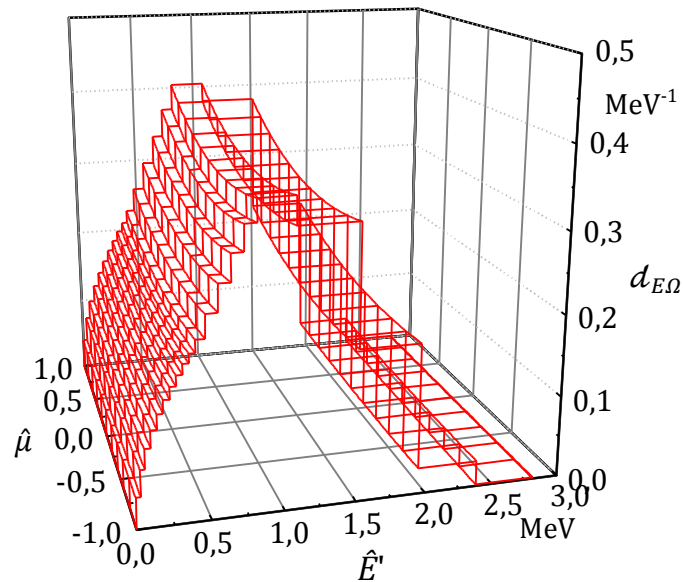


Abbildung 3.4: Energie-Richtungsichte von Stickstoff-14 für die (n, 2n)-Reaktion von Neutronen mit 14 MeV Primärenergie in Kalbach-Mann-Darstellung.

Eine Darstellung der Richtungsichten mit Legendre-Polynomen oder als Tabelle erfolgt identisch zum vorhergehenden Abschnitt. Allerdings können die Dichtefunktionen in diesem Fall auch im Laborsystem vorliegen.

Ein Beispiel für eine zweidimensional tabellierte linear interpolierte Dichtefunktion im Laborsystem stellt die in Abbildung 3.5 gegebene Energie-Richtungsichte der $^7\text{Li}(n, 2n)$ -Reaktion für $E = 14$ MeV dar.

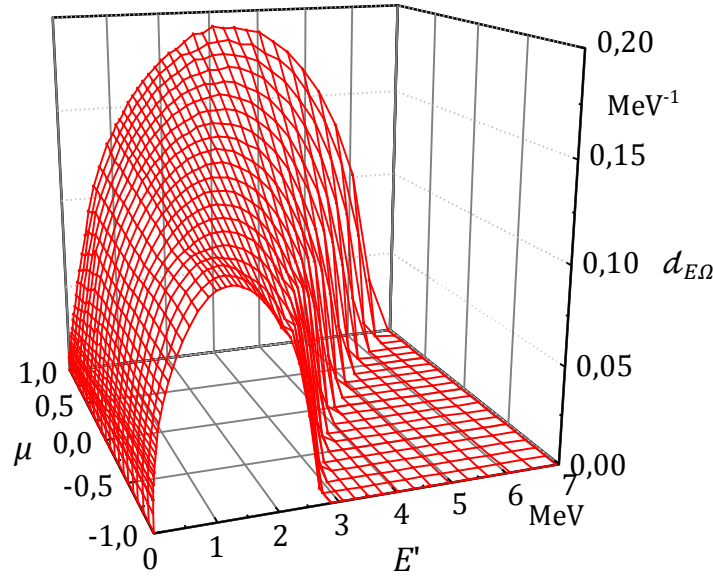


Abbildung 3.5: Energie-Richtungsdichte von Lithium-7 für die (n, 2n)-Reaktion von Neutronen mit 14 MeV Primärenergie nach JEFF-3.1 in linear tabellierter Darstellung.

Falls keine Information über Energie-Richtungs-Korrelationen bekannt sind, kann die Energie-Richtungsdichte auch vollständig in unabhängige Energie- und Richtungsichten faktorisiert angegeben werden. Die Richtungsichten werden in diesem Fall wie bei elastischer Streuung in Abschnitt 4 der ENDF-Datei gegeben. Die Energiedichten werden in Abschnitt 5 beschrieben. Dabei sind neben einer tabellarischen Angabe auch die Verwendung der analytischen Ausdrücke

$$\begin{aligned}
 f_{\text{Max}}(E, E') &= \frac{\sqrt{E'}}{I(E)} \cdot \exp\left(-\frac{E'}{a(E)}\right) \\
 f_{\text{Watt}}(E, E') &= \frac{\sinh\left(\sqrt{b(E) \cdot E'}\right)}{I(E)} \cdot \exp\left(-\frac{E'}{a(E)}\right) \\
 f_{\text{Evap}}(E, E') &= \frac{E'}{I(E)} \cdot \exp\left(-\frac{E'}{a(E)}\right)
 \end{aligned} \tag{3.8}$$

für ein Maxwell-Spektrum, ein Watt-Spektrum oder ein sogenanntes Evaporationsspektrum möglich. $I(E)$ stellt jeweils die Normierung der Funktion dar. a und b sind Modellparameter. Damit die Energieerhaltung gewahrt bleibt, sind alle Verteilungen durch eine primärenergieabhängige Maximalenergie nach oben begrenzt.

3.1.4 Thermische Neutronenstreuung

Wechselwirkungsdaten zur Streuung thermischer Neutronen an Nukliden mit vorgegebener chemischer Bindung werden in einer separaten Unterbibliothek für verschiedene Materialtemperaturen angegeben. Der differentielle Wirkungsquerschnitt wird in einen vollelastischen Anteil ohne Energieübertrag und einen unelastischen Anteil unter Anregung von Molekülschwingungen bzw. Phononen unterteilt. Je nachdem, ob das

Material polykristallin oder amorph ist, wird der Wirkungsquerschnitt entweder für kohärente oder inkohärente vollelastische Streuung angegeben.

Die kohärente vollelastische Streuung wird anhand der Bragg-Reflexionen des Kristalls definiert. Der differentielle Wirkungsquerschnitt $\sigma_{E\Omega}$ beziehungsweise der Wirkungsquerschnitt σ werden über

$$\begin{aligned}\sigma_{E\mu}(E, E', \mu) &= \frac{1}{E} \sum_{i=1}^{E_i < E} s_i \cdot \delta(\mu - \mu_i(E)) \cdot \delta(E - E') \\ \sigma(E) &= \frac{1}{E} \sum_{i=1}^{E_i < E} s_i\end{aligned}\tag{3.9}$$

ausgedrückt. Dabei gibt s_i die Intensität der i ten Bragg-Reflexion an. $\mu_i = \cos 2\theta_i$ bezeichnet den Kosinus des doppelten Bragg-Winkels θ_i bezüglich der i ten Gitternetzebene. Die Energieschwelle, ab der konstruktive Interferenz an der i ten Ebene stattfinden kann, wird mit E_i bezeichnet. Aus der Bragg'schen Beziehung für die erste Reflexionsordnung

$$\begin{aligned}\lambda &= 2d_i \sin \theta_i \\ \Rightarrow \min_{\theta_i} \lambda &= \lambda_i = 2d_i\end{aligned}\tag{3.10}$$

und der de-Broglie-Wellenlänge eines freien Neutrons

$$\lambda = \frac{h}{p}\tag{3.11}$$

kann diese in klassischer Kinematik über

$$E_i = \frac{p_i^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda_i^2}\tag{3.12}$$

berechnet werden. Aus (3.10) und (3.12) ergibt sich der Richtungskosinus des Streuwinkels

$$\mu_i(E) = \cos 2\theta_i = 1 - 2 \sin^2 \theta_i = 1 - \frac{2\lambda^2}{\lambda_i^2} = 1 - \frac{2E_i}{E}\tag{3.13}$$

in Abhängigkeit der Neutronenenergie E . Nach der Nomenklatur des ENDF-Formats sind die Schwellwerte E_i bezüglich ihrer Größe sortiert. Der kohärente Wirkungsquerschnitt verschwindet daher für $E < E_1$.

Für die inkohärente vollelastische Streuung sind der differentielle Wirkungsquerschnitt und der Wirkungsquerschnitt durch

$$\sigma_{E\mu}(E, E', \mu) = \frac{\sigma_b}{2} \cdot e^{-2E \cdot W \cdot (1-\mu)} \cdot \delta(E - E'),\tag{3.14a}$$

$$\sigma(E) = \frac{\sigma_b}{2} \cdot \frac{1 - e^{-4E \cdot W}}{2E \cdot W} \quad (3.15b)$$

gegeben. In diesem Kontext bezeichnet W den temperaturabhängigen Debye-Waller-Faktor und σ_b den inkohärenten gebundenen Wirkungsquerschnitt des Stoffes. Da der Kern durch die chemische Bindung fixiert ist und keinen Rückstoß aufnehmen kann, ändert sich die effektive Masse des Neutrons im Schwerpunktsystem, und der gebundene Wirkungsquerschnitt wird im Vergleich zum freien Wirkungsquerschnitt σ auf

$$\sigma_b = \left(\frac{\alpha + 1}{\alpha} \right)^2 \cdot \sigma \quad (3.16)$$

erhöht [48].

Die unelastische Neutronenstreuung wird im Rahmen der ersten Born'schen Näherung

$$\begin{aligned} \sigma_{E\mu}(E, E', \mu) &= \sqrt{\frac{E'}{E}} \cdot \frac{\sigma_b}{2k_B T} \cdot S(\hat{k}, \hat{\omega}) \cdot e^{-\frac{\hat{\omega}}{2}} \\ \hat{k} &= \frac{E' + E - 2\mu\sqrt{EE'}}{\alpha k_B T} \\ \hat{\omega} &= \frac{E' - E}{k_B T} \end{aligned} \quad (3.17)$$

über den dynamischen Strukturfaktor $S(k, \omega)$ ausgedrückt [49]. Dabei sind \hat{k} und $\hat{\omega}$ einheitenlose Koordinaten, welche jeweils proportional zum Impuls- bzw. Energieübertrag der Streuung sind. Der dynamische Strukturfaktor kann zweidimensional tabelliert oder analytisch gegeben sein.

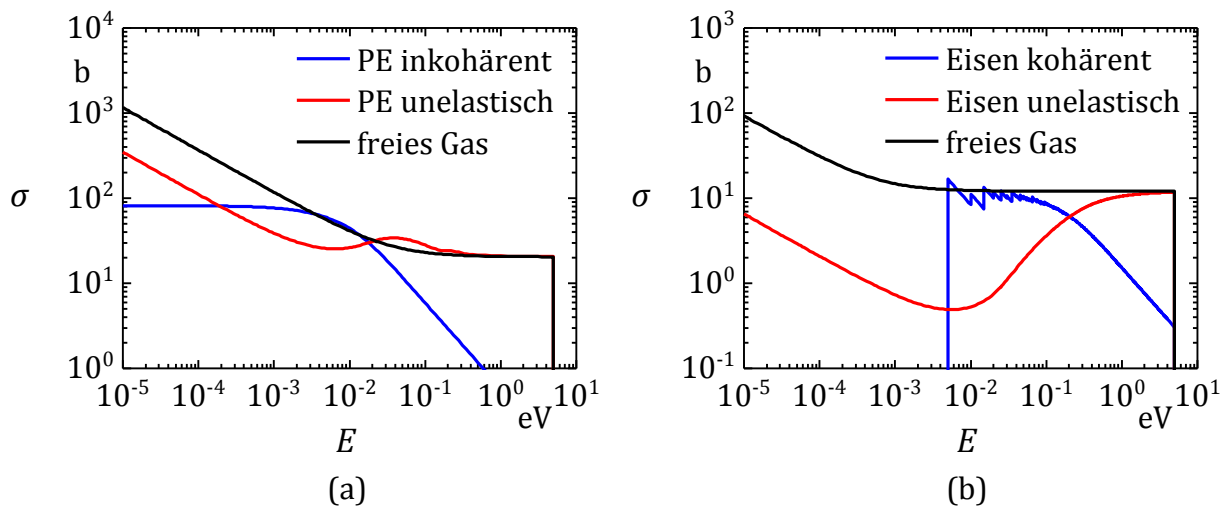


Abbildung 3.6: Thermische Wirkungsquerschnitte für freies und in PE gebundenes Wasserstoff (a) sowie freies und metallisches Eisen (b) nach ENDF/B-VII.0.

Zwei Beispiele für die sich ergebenden chemisch gebundenen Querschnitte im Vergleich zu freien Querschnitten sind in Abbildung 3.6 für Wasserstoff in Polyethylen und

metallisches Eisen dargestellt. In beiden Fällen weichen die Wirkungsquerschnitte für chemisch gebundene Atome in Summe deutlich von den Querschnitten für freie Atome ab. Insbesondere der kohärente vollelastische Streuquerschnitt bei kristallinen Materialien wie Eisen weist starke Sprünge an den Schwellenergien E_i der Bragg-Reflexionen auf.

3.2 Aufbereitung der Wechselwirkungsdaten

Zur Umsetzung des Neutronentransports mittels Monte-Carlo-Methoden nach Abschnitt 2.2.4 ist eine Aufbereitung der Wechselwirkungsdaten für eine effiziente Auswertung notwendig. In Abschnitt 3.2.1 wird zunächst die im Transportalgorithmus verwendete Darstellung der Daten vorgestellt. Um die Wirkungsquerschnitte und die zugehörigen Energie-Richtungsichten einzelner Nuklide sinnvoll für ein Material zusammenfassen zu können, wird eine Histogramminterpolation an vorgegebenen Energiestützstellen verwendet. Die Wahl der entsprechenden Energiegruppenstruktur wird in Abschnitt 3.2.2 diskutiert. In den Abschnitten 3.2.3 bis 3.2.5 wird die Erzeugung der gruppengemittelten Wechselwirkungsdaten für den Transportalgorithmus vorgestellt. Diese werden vorab für jedes Nuklid erzeugt. Im Programm werden vor Beginn der Simulation aus diesen mikroskopischen Daten die entsprechenden makroskopischen Materialeigenschaften bestimmt.

3.2.1 Verwendete Darstellung der makroskopischen Materialeigenschaften

Es wird angenommen, dass das Transportvolumen aus homogenen Materialien mit glatten Begrenzungen besteht. Ein Material k ist damit durch seine Massendichte ϱ_k sowie die relativen Anteile $r^{(k,l)}$ der beinhalteten Nuklide l definiert. In den evaluierten Neutronenbibliotheken sind für jedes Nuklid zunächst die relative Nuklidmasse α_l , die differentiellen Wirkungsquerschnitte $\sigma_{E\mu}^{(l,m)}(E, E', \mu)$ der Reaktionen m am Nuklid l und deren Ausbeuten $Y^{(l,m)}(E)$ gegeben.

Zur Bestimmung des Transportintegrals (2.35)

$$\begin{aligned}\zeta_i(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t) &= \mathcal{T}(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}, t' \rightarrow t) \circ \chi_i(\mathbf{r}', E, \boldsymbol{\Omega}, t') \\ &= \Sigma_t(\mathbf{r}, E) \cdot \int_{-\infty}^0 \chi_i\left(\mathbf{r} - \boldsymbol{\Omega} \cdot R, E, \boldsymbol{\Omega}, t - \frac{R}{v}\right) \cdot \exp(-\beta(R)) dR, \\ \beta(R) &= \int_0^R \Sigma_t(\mathbf{r} - \boldsymbol{\Omega} \cdot R', E) dR'\end{aligned}$$

muss die totale Wirkungsquerschnittsdichte $\Sigma_t(\mathbf{r}, E)$ in Abhängigkeit des Ortes \mathbf{r} und der Energie E bekannt sein. Dieser berechnet sich für ein Material k der Massendichte ϱ_k über den Ausdruck

$$\Sigma_t^{(k)} = \sum_l \rho^{(k,l)} \cdot \sigma_t^{(l)} = \frac{\varrho_k}{m_n \cdot \sum_l r^{(k,l)} \cdot \alpha_l} \cdot \sum_l r^{(k,l)} \cdot \sigma_t^{(l)} \quad (3.18)$$

aus den gewichteten totalen Wirkungsquerschnitten $\sigma_t^{(l)}$ der Nuklide l . Die Berechnung erfolgt für jede Simulation anhand vorgegebener Materialzusammensetzungen aus den gruppierten totalen Nuklidquerschnitten $\sigma_t^{(l)}$. Für den eingesetzten Transportalgorithmus wird daraus zusätzlich die kleinste mittlere freie Weglänge aller Materialien

$$\Lambda_m^{(k)} = \min_k \left\{ \frac{1}{\Sigma_t^{(k)}} \right\} \quad (3.19)$$

für jede Energiegruppe bestimmt.

Weiterhin ist zur Auswertung des Stoßintegrals (2.36)

$$\begin{aligned} \chi_{i+1}(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t) &= \mathcal{C}(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, \boldsymbol{\Omega}' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}) \circ \zeta_i(\mathbf{r}, E', \boldsymbol{\Omega}', t) \\ &= \iint_{4\pi} \int_0^\infty \zeta_i(\mathbf{r}, E', \boldsymbol{\Omega}', t) \cdot \sum_{l,m} Y^{(l,m)}(E') \cdot P_{klm}(\mathbf{r}, E') \cdot d_{E\mu}^{(l,m)}(\mathbf{r}, E', E, \mu) dE' d\boldsymbol{\Omega}', \\ P_{klm}(\mathbf{r}, E) &= \frac{r^{(k,l)} \cdot \sigma^{(l,m)}(\mathbf{r}, E)}{\sum_{l'} r^{(k,l')} \cdot \sigma^{(l',m)}(\mathbf{r}, E)}, \\ d_{E\mu}^{(l,m)}(\mathbf{r}, E, E', \mu) &= \frac{\Sigma_{E\mu}^{(l,m)}(\mathbf{r}, E, E', \mu)}{\Sigma^{(l,m)}(\mathbf{r}, E)} \end{aligned}$$

die Wahrscheinlichkeit P_{klm} einer Reaktion m am Nuklid l im Material k , die Neutronenausbeute $Y^{(l,m)}$ der Reaktion sowie die Energie-Richtungsdichte $d_{E\mu}^{(l,m)}$ der durch die Reaktion erzeugten Neutronen erforderlich. Während die Ausbeuten und Energie-Richtungsdichten bereits vorab für jedes Nuklid aufbereitet werden, müssen die Reaktionswahrscheinlichkeiten für jedes Material zu Beginn einer Strahlungstransportrechnung bestimmt. In Anlehnung an den vorhandenen Photonentransportalgorithmus in AMOS wird dabei zunächst die Wahrscheinlichkeit

$$P_a^{(k)} = \frac{\sum_l r^{(k,l)} \cdot \sigma_a^{(l)}}{\sum_l r^{(k,l)} \cdot \sigma_t^{(l)}} \quad (3.20)$$

für eine Absorptionsreaktion im Material k abgetrennt. Die restlichen Reaktionen werden über die bedingte Wahrscheinlichkeit

$$P'_{klm} = \frac{P_{klm}}{1 - P_a^{(k)}} \quad (3.21)$$

einer Nichtabsorptionsreaktion m am Nuklid l charakterisiert.

Die gewählte Faktorisierung in totale Wirkungsquerschnittsdichten, Reaktionswahrscheinlichkeit und Energie-Richtungsdichte trennt die in den evaluierten Daten vorliegenden differentiellen Wirkungsquerschnittsdichten in Bestandteile, die an verschiedenen Stellen in der Simulation benötigt werden. Die Reaktionen werden so zusammengefasst, dass sie jeweils mit einer gemeinsamen Dichtefunktion darstellbar sind.

So werden die elastische und alle gegebenen inelastischen Streuungen jeweils einzeln behandelt, da bei ihnen der Richtungskosinus μ eindeutig von der Sekundärenergie E' und der Anregungsenergie E_i^* abhängt. Alle Kernreaktionen mit Neutronen als Reaktionsprodukt werden gemeinsam als Komplexreaktion mit einer Energie-Richtungsdichte sowie zugehöriger Neutronenausbeute beschrieben. Kernreaktionen, bei denen nur Photonen und geladene Teilchen entstehen, werden zu einer gemeinsamen Absorptionsreaktion zusammengefasst.

Die bei Kernreaktionen entstehenden geladenen Teilchen werden meist auf kurzer Strecke abgebremst und werden deshalb im Programm als lokale Energiedeposition berücksichtigt. Die bei der Abregung des Kerns in Form von Photonen frei werdende Anregungsenergie E_i^* wird aufgrund der unbefriedigenden Datenlage bezüglich der Abregungsvorgänge zurzeit nicht berücksichtigt. Es wird stattdessen angenommen, dass die Energie in Form von Photonen aus dem Transportvolumen entkommt.

3.2.2 Empirische Energiegruppenstruktur

Die Wahl einer optimalen Energiegruppenstruktur ist durch die stark unterschiedlichen Nuklidwirkungsquerschnitte problemabhängig. Eine Einteilung für alle Anwendungszwecke kann daher nur ein Kompromiss sein. Alle dem Autor bekannten Programme nutzen entweder eine speziell angepasste Struktur mit 10 bis 300 Gruppen oder logarithmisch äquidistante Intervalle mit maximal 50 Gruppen je Dekade.

Für diese Arbeit wird eine Energieeinteilung benötigt, welche die Wirkungsquerschnitte mit allen wichtigen Resonanzen detailliert abbilden kann. Die entwickelte Gruppenstruktur ist über eine empirische Argumentation festgelegt worden. Dazu sind zunächst für den Neutronentransport wichtige Nuklide identifiziert und die zugehörigen evaluierten totalen Wirkungsquerschnitte untersucht worden. In Abbildung 3.7 sind beispielhaft einige Wirkungsquerschnitte auf Basis der JEFF-3.1-Bibliothek [12] dargestellt.

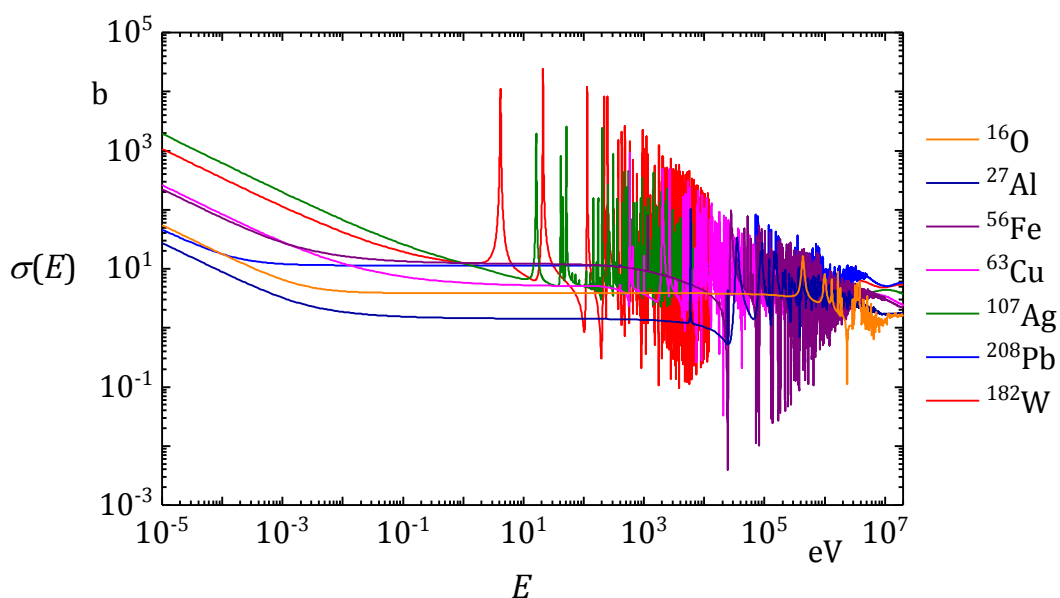


Abbildung 3.7: Totaler Wirkungsquerschnitt wichtiger Nuklide nach JEFF-3.1.

Die Daten wurden den mit dem Programm JANIS 3.0 mitgelieferten ENDF-Dateien entnommen [46]. Es handelt sich um JEFF-3.1-Daten, welche vom Programm NJOY [15] aufbereitet worden sind. Dabei ist die thermische Resonanzverbreiterung für Raumtemperatur durchgeführt worden. Weiterhin sind zusätzliche Stützstellen in die Daten eingefügt worden, sodass die Querschnitte im Rahmen der Unsicherheit durch lineare Interpolation darstellbar sind. Der Abstand benachbarter Stützstellen ist damit ein Maß für die Variation des Wirkungsquerschnitts je Energie.

Um eine geeignete Breite der Energiegruppen zu bestimmen, ist der Abstand benachbarter Stützstellen geteilt durch die mittlere Energie in Abbildung 3.8 grafisch aufgetragen worden. Der Quotient entspricht der relativen Energieauflösung der Querschnittsdaten. Logarithmisch äquidistante Stützstellen bilden einen konstanten Verlauf. Kleine Werte bedeuten eng benachbarte Stützstellen.

Anhand der dargestellten relativen Auflösungen ist eine Gruppenstruktur mit 2357 Energiegruppen gewählt worden. Deren relative Gruppenbreite ist in der Abbildung als durchgezogene blaue Kurve dargestellt.

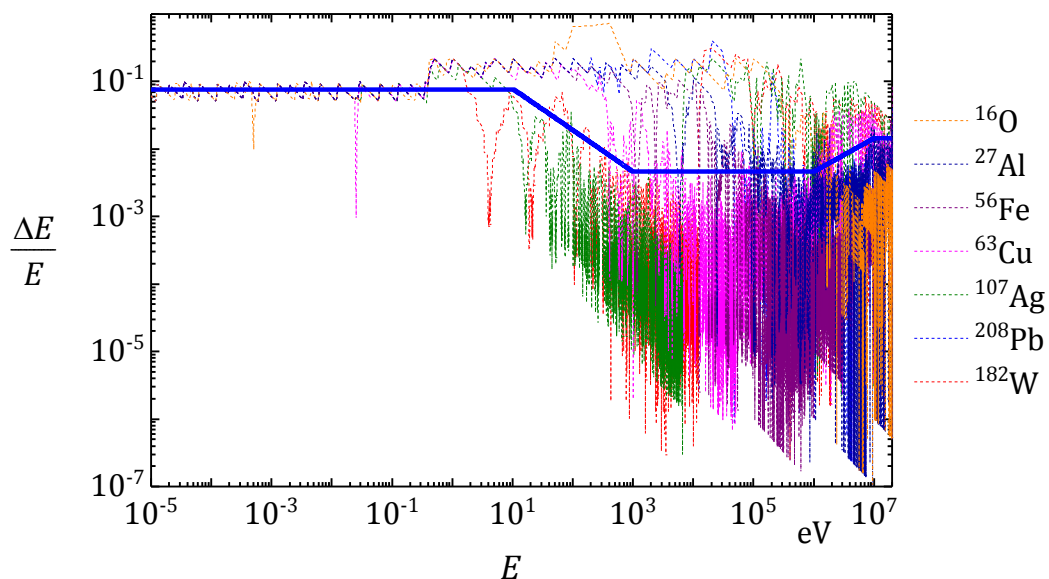


Abbildung 3.8: Relative Energieauflösung der von NJOY für lineare Interpolation aufbereiteten Wirkungsquerschnitte aus Abbildung 3.7. Die durchgezogene blaue Kurve entspricht der Auflösung der gewählten Gruppenstruktur.

Für langsame Neutronen bis 10 eV werden 30 logarithmisch äquidistante Gruppen je Dekade verwendet. Da oberhalb von 10 eV starke Resonanzen einsetzen, wird hier die Anzahl von Gruppen kontinuierlich bis 500 je Dekade gesteigert. Eine weitere Erhöhung der Gruppenzahl ist nicht sinnvoll, da sonst die für jede Gruppe zu bestimmenden Energie- und Richtungsichten zu viel Speicherplatz einnehmen.

Für Energien größer als 1 MeV wird wieder eine geringere Auflösung verwendet. Die Ursache dafür ist, dass ab wenigen MeV viele Kernreaktionen möglich sind. Diese müssen mit doppeltdifferentiellen Wirkungsquerschnitten beschrieben werden, deren

Aufbereitung deutlich länger dauert als die von eindimensionalen Richtungsichten für elastische und inelastische Streuung. Physikalisch ist die Reduktion der Gruppenzahl gerechtfertigt, da trotz der gleichbleibend dichten Stützstellen geringere Variationen im Wirkungsquerschnitt auftreten (vgl. Abbildung 3.7). Ab 10 MeV wird wieder eine konstante Gruppendichte verwendet.

Zur Aufbereitung der ENDF-Daten ist zunächst ein Programm erstellt worden, welches die Daten und deren Interpolationsvorschriften einlesen und auswerten kann. Die Daten werden dann über eine vorgegebene Energiegruppenstruktur gemittelt. Bei Bedarf kann statt der oben vorgegebenen auch jede andere Gruppeneinteilung zugrunde gelegt werden. Die Energie-Richtungsichten werden ins Laborsystem transformiert und in Form linear interpolierter Dichtefunktionen dargestellt.

3.2.3 Erzeugung von Gruppenquerschnitten

Um einen physikalisch sinnvollen Mittelwert des Wirkungsquerschnitts in einer Energiegruppe i zu erhalten, wird nicht über den Wirkungsquerschnitt, sondern über die Reaktionsdichte bezüglich einer spektralen Teilchenfluenz $\Phi_E(E)$ gemittelt [44]. Nach (2.20) gilt für die Gruppenreaktionsrate

$$n_R^{(i)} = \int_{E_i}^{E_{i+1}} \sigma(E) \cdot \Phi_E(E) dE \stackrel{\text{def}}{=} \sigma_i \cdot \int_{E_i}^{E_{i+1}} \Phi_E(E) dE = \sigma_i \cdot \Phi_E^{(i)}, \quad (3.22)$$

mit der Gruppenfluenz $\Phi_E^{(i)}$. Der Gruppenquerschnitt

$$\sigma_i = \frac{1}{\Phi_E^{(i)}} \cdot \int_{E_i}^{E_{i+1}} \sigma(E) \cdot \Phi_E(E) dE. \quad (3.23)$$

stellt also das Verhältnis aus Reaktionsrate in der Gruppe $n_R^{(i)}$ und Gruppenfluenz $\Phi_E^{(i)}$ dar. Da das Energiespektrum nicht a priori bekannt ist, können nur Modellspektren verwendet werden. Das einfachste Modell ist eine Gleichverteilung bezüglich der Energie, $\Phi_E(E) = \text{const.}$ Ein realistischeres Spektrum besteht aus einem Maxwell-Anteil thermischer Neutronen und einem $1/E$ -Verlauf für höhere Energien. Ein solches Spektrum entsteht näherungsweise bei Moderation schneller Neutronen in schwach absorbierenden Materialien mit nahezu konstantem Wirkungsquerschnitt [44].

In Wirklichkeit wird das Spektrum jedoch durch Resonanzen im Querschnitt stark beeinflusst. Dabei wird aus einem ursprünglich gleichmäßigen Energiespektrum nach wenigen mittleren freien Weglängen ein großer Teil der Neutronen nahe einer Resonanzenergie herausgestreut. Dabei sinkt der Anteil der Neutronen, welche durch die Resonanz mit hohem Wirkungsquerschnitt reagieren können. Dementsprechend sinkt die Reaktionsrate in der Energiegruppe mit zunehmender Flugstrecke. Bei Resonanzen, deren Halbwertsbreite in der Größenordnung einer Energiegruppe liegen, ist diese sogenannte Selbstabschirmung besonders deutlich. Die spektrale Teilchenfluenz wird für die folgenden Betrachtungen in ein glattes Modellspektrum $\Phi_E^m(E)$ sowie einen Resonanzanteil faktorisiert.

Ein einfaches Modell zur Beschreibung abgeschirmter Gruppenwirkungsquerschnitte ist das Bondarenko-Modell [50]. Die Resonanzen der verschiedenen Nuklide im Material werden dabei als schmal gegen den mittleren Energieverlust einer elastischen Streuung angenommen. Die gesamte Wirkungsquerschnittsdichte wird in den Beitrag eines Nuklids mit Resonanz $n_R \sigma_R(E)$ sowie einen näherungsweise konstanten Hintergrundbeitrag $n_0 \sigma_0$ zerlegt. Dabei bezeichnen n_R beziehungsweise n_0 die Teilchenanzahldichten des Nuklids mit Resonanz und der restlichen Nuklide. Der Bondarenko-Querschnitt der Resonanz wird nun über

$$\sigma_R^{(i)}(n_0 \sigma_0) = \frac{\int_{E_i}^{E_{i+1}} \sigma_R(E) \cdot \frac{\Phi_E^m(E)}{n_0 \sigma_0 + n_R \sigma_R(E)} dE}{\int_{E_i}^{E_{i+1}} \frac{\Phi_E^m(E)}{n_0 \sigma_0 + n_R \sigma_R(E)} dE} \quad (3.24)$$

bestimmt [50].

Im Falle dominierenden Hintergrunds $n_0 \sigma_0 / n_R \sigma_R \rightarrow \infty$ ergibt sich der nicht abgeschirmte Grenzfall

$$\sigma_R^{(i)}(\infty) = \frac{1}{\Phi_E^{(i)}} \cdot \int_{E_i}^{E_{i+1}} \sigma_R(E) \cdot \Phi_E^m(E) dE. \quad (3.25)$$

Dies entspricht einer unendlich dünnen Verteilung des Nuklids im Material. Da quasi keine Neutronen mit dem Nuklid wechselwirken, ist die Selbstabschirmung vernachlässigbar. Im gegensätzlichen Grenzfall $n_0 \sigma_0 / n_R \sigma_R \rightarrow 0$ liegt das Nuklid mit der Resonanz rein vor. Hier ergibt sich der vereinfachte Ausdruck

$$\sigma_R^{(i)}(0) = \Phi_E^{(i)} \cdot \left[\int_{E_i}^{E_{i+1}} \frac{\Phi_E^m(E)}{\sigma_R(E)} dE \right]^{-1}, \quad (3.26)$$

der Gruppenquerschnitt entspricht also dem Inversen des mittleren inversen Wirkungsquerschnitts.

Ein weiteres Verfahren, welches vom Strahlungstransportprogramm TART [9] verwendet wird, ist die sogenannte Multi-Band-Näherung. Hierbei werden je Energiegruppe i zwei Wirkungsquerschnitte $\sigma_{i,1}$ und $\sigma_{i,2}$ abgelegt. Vor jeder Bestimmung eines wechselwirkungsfreien Wegs wird entschieden, ob mit Wahrscheinlichkeit $P_{i,1}$ der Wirkungsquerschnitt $\sigma_{i,1}$ oder mit Wahrscheinlichkeit $P_{i,2} = 1 - P_{i,1}$ der Wirkungsquerschnitt $\sigma_{i,2}$ verwendet wird.

Im Folgenden werden die verschiedenen Verfahren am Beispiel einer Resonanz von Aluminium illustriert. In Abbildung 3.9 ist dazu der totale Wirkungsquerschnitt im Energieintervall von 5,75 keV bis 6,03 keV dargestellt. Der betrachtete Energiebereich entspricht der 439ten Energiegruppe der in TART verwendeten logarithmisch äquidistanten Einteilung mit 50 Gruppen je Dekade. Zum Vergleich sind in der Abbildung auch der verdünnte und der abgeschirmte Gruppenquerschnitt über das gesamte

Intervall, sowie die verdünnten Gruppenquerschnitte der AMOS-Gruppenstruktur dargestellt.

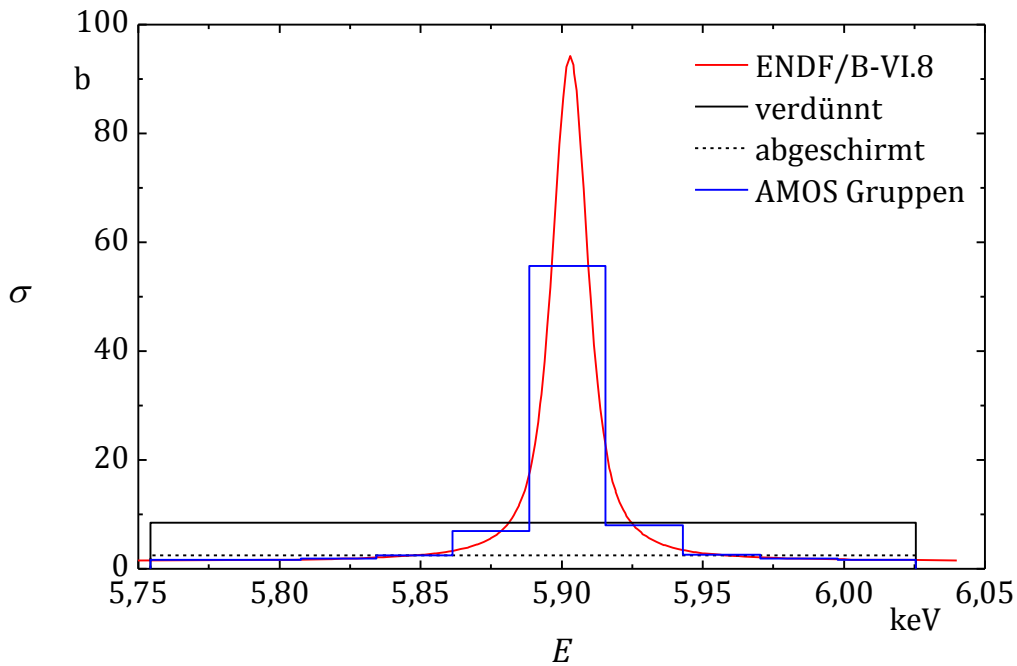


Abbildung 3.9: Ausschnitt des totalen Wirkungsquerschnitts von ^{27}Al (rot). Schwarz dargestellt sind mittlere Querschnitte für 50 Gruppen je Dekade (durchgezogen: verdünnt, gestrichelt: abgeschirmt). Die blaue Kurve entspricht mittleren Querschnitten bezüglich der Gruppenstruktur von AMOS.

Um den Einfluss der Selbstabschirmung bezüglich des gewählten Energieintervalls zu untersuchen, wird die ungestreute Fluenz eines gleichverteilten Spektrums in einem unendlich ausgedehnten Aluminiumquader in Abhängigkeit der Flugstrecke bestimmt. Für eine zur x -Achse parallele Neutronenquelle am Ort $x_0 = 0$ ergibt sich nach (2.28) bei verschwindendem Streuanteil folgender Ausdruck

$$\Phi^u(x) = \Phi(0) \cdot \int_{E_i}^{E_{i+1}} \exp(-\Sigma_t(E) \cdot x) dE \quad (3.27)$$

für die Gruppenfluenz im Abstand x . Die numerisch berechneten Fluenzen in Abhängigkeit der Materialdicke sind in Abbildung 3.10 für verschiedene Approximationen des Wirkungsquerschnitts dargestellt. Neben den in enthaltenen Wirkungsquerschnitten wird auch die Multi-Band-Näherung von TART eingesetzt. Die Parameter betragen anhand der im TART-Handbuch [39] gegebenen Berechnungsvorschrift $P_1 = 0,17152$, $\sigma_1 = 39,2372$ b und $\sigma_2 = 2,06413$ b.

Durch den im Energieintervall variierenden Wirkungsquerschnitt fällt die ungestreute Fluenz nicht exponentiell ab. Nach anfänglich starkem Abfall mit dem nicht abgeschirmten Querschnitt verläuft die restliche Kurve durch Herausstreuen der Neutronen mit höherem Wirkungsquerschnitt wesentlich flacher. Der Trend wird für große Abstände

durch den abgeschirmten Querschnitt reproduziert, aber der genaue Verlauf kann nicht durch eine einzige Exponentialkurve abgebildet werden.

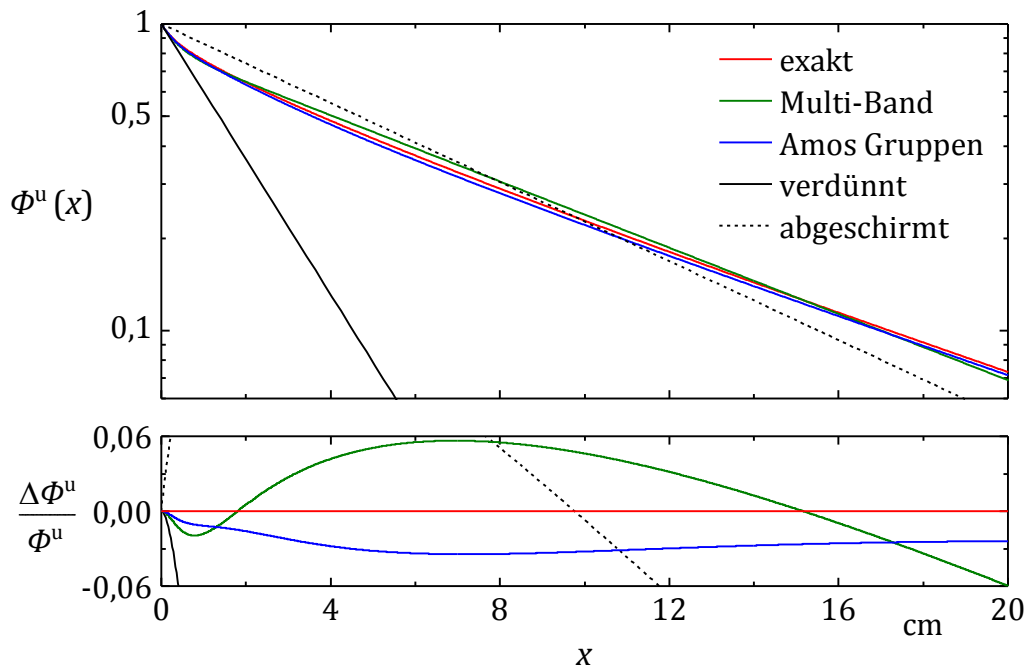


Abbildung 3.10: Ungestreute Fluenz nach einer Aluminiumschicht in Abhängigkeit der Schichtdicke. Neben dem exakten Ergebnis für kontinuierlichen Wirkungsquerschnitt sind die Kurven für den verdünnten und abgeschirmten Gruppenquerschnitt, die Multi-Band-Methode von TART sowie die Gruppenstruktur von AMOS dargestellt. Unten: Relative Abweichung zum exakten Ergebnis.

Die Repräsentation mit den nicht abgeschirmten Gruppenquerschnitten in der AMOS-Gruppenstruktur führt zu einer Abweichung von weniger als 4% und liegt damit näher an der Referenzkurve als die Multi-Band-Methode. Durch Berücksichtigung einer Abschirmung könnte die Abweichung noch reduziert werden. Andererseits würde dadurch der nicht abgeschirmte Grenzfall $x \ll \lambda$ nicht mehr korrekt reproduziert werden. Standardmäßig werden in der Datenaufbereitung daher die nicht abgeschirmten Gruppenquerschnitte erzeugt.

Für die Bestimmung der gruppengemittelten Querschnitte wird das glatte Modellspektrum

$$N_E(E) = \frac{\Phi_E^m(E)}{\Phi} = \frac{E}{(k_B T)^2} \cdot \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right) + \frac{0,0382 \cdot E^2}{E^3 + (1,825 \cdot k_B T)^3} \quad (3.28)$$

mit $T = 293,15$ K verwendet (vgl. Abbildung 3.11). Es entspricht bis 1 eV dem Neutronspektrum im Inneren einer Graphitkugel mit Radius 0,5 m und mittlerer Punktquelle mit Emissionsenergie von 1 MeV. Oberhalb von 1 eV wird asymptotisch ein $1/E$ -Verlauf angenommen, wie er in Materialien mit dominierender elastischer Streuung entsteht.

Dieser wird durch den zweiten Term des Spektrums erzeugt. Der erste Term stellt ein Maxwell-Spektrum von Neutronen im thermischen Gleichgewicht mit dem Material dar.

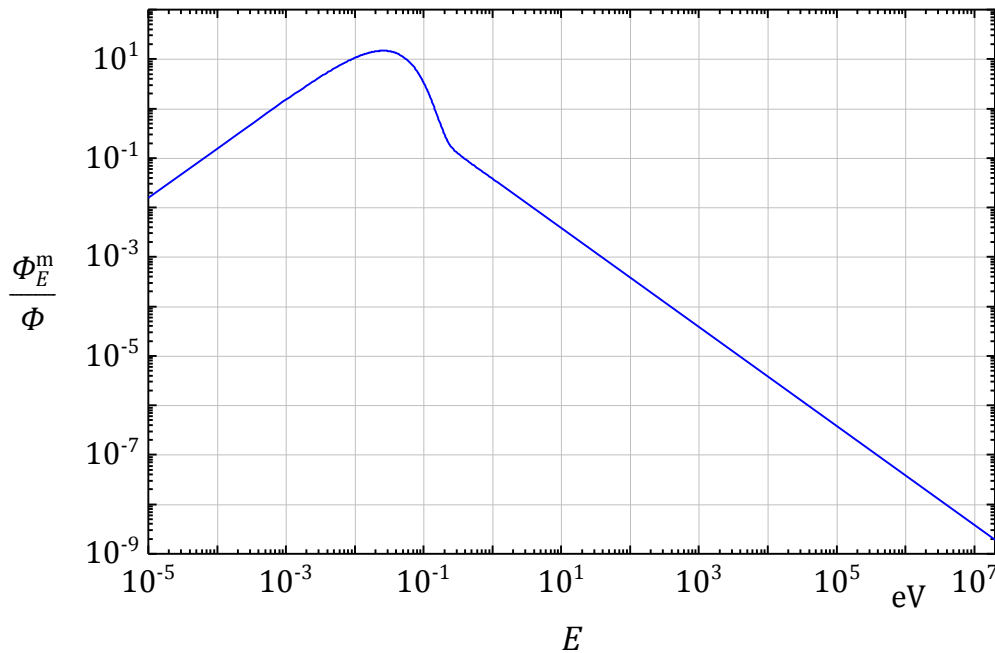


Abbildung 3.11: Modellspektrum zur Berechnung von Gruppenwirkungsquerschnitten. Im Bereich thermischer Neutronen wird ein Maxwell-Spektrum angenommen, für höhere Energien ein $1/E$ -Spektrum.

3.2.4 Linearisierung von Dichtefunktionen

Für eine einfache Auswertung sowie ein effizientes Erheben von Stichproben werden die Dichtefunktionen der gestreuten Teilchenenergien und -richtungen in Form eines linearen Polynomzugs abgelegt. Dessen Stützpunkte werden in Anzahl und Position so gewählt, dass die Abweichung zur wahren Funktion innerhalb eines vorgegebenen Genauigkeitsparameter κ liegt. Der verwendete Algorithmus zur Wahl der Stützpunkte wird im Folgenden erläutert.

Die evaluierte Dichtefunktion wird mit $f(x)$ und die aufbereitete stückweise lineare Approximation mit $g(x)$ bezeichnet. Die Approximationsgleichung für N Intervalle $[x_i, x_{i+1}]$ mit $i = 0, \dots, N - 1$ ist durch

$$g(x) = \begin{cases} 0, & x < x_0 \\ y_i \cdot \frac{x_{i+1} - x}{x_{i+1} - x_i} + y_{i+1} \cdot \frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i}, & x_i \leq x < x_{i+1} \\ 0, & x > x_N \end{cases} \quad (3.29)$$

definiert. Zur Auswahl der Stützstellenanzahl und -position wird zunächst $y_i = f(x_i)$ verwendet. Um bei gegebener Stützstellenwahl eine minimale Abweichung der linearen Approximation zu erreichen, wird dann die Stützstellenhöhe y_i optimiert. Dies sorgt dafür, dass bei Krümmungen der Kurve keine systematischen Unter- oder Überschätzungen auftreten.

Es wird ein dreiteiliger Algorithmus eingesetzt. Im ersten Schritt wird der Verlauf der Funktion mit hoher Genauigkeit abgetastet. Dies soll sicherstellen, dass auch starke Fluktuationen korrekt abgebildet werden. Dazu werden zunächst 32 äquidistante Stützstellen gesetzt und solange eine weitere Stützstelle in der Mitte jedes Intervalls eingefügt, bis die Abweichung Δ_i unter 10% der Vorgabegenauigkeit κ gefallen ist.

Die Bestimmung der Abweichung erfolgt dabei jeweils für ein Intervall $[x_i, x_{i+1}]$. Dazu wird im Intervall der gewichtete Mittelwert der Differenzen zwischen $f(x)$ und $g(x)$

$$\begin{aligned}\Delta_i^{\text{abs}} &= \frac{3}{2} \sum_{j=1}^J w_j \cdot |g(x(i, j)) - f(x(i, j))| \\ &= \frac{3}{2} \sum_{j=1}^J w_j \cdot |(1 - a_j) \cdot f(x_i) + a_j \cdot f(x_{i+1}) - f(x(i, j))|\end{aligned}\quad (3.30)$$

$$\text{mit } x(i, j) = x_i + a_j \cdot (x_{i+1} - x_i)$$

gebildet. Als Parameter a_j der Zwischenstützstellen $x(i, j)$ und als Gewichte w_j werden diejenigen der Gauß-Legendre-Quadratur mit $J = 5$ Stützstellen [51] verwendet. Ohne den Vorfaktor $3/2$ entspricht dies dem Mittelwert der betragsmäßigen Abweichung zwischen f und g . Der Vorfaktor ist so gewählt, dass sich für ein Polynom f zweiten Grades die maximale statt der mittleren Abweichung ergibt.

Um bei Variationen über mehrere Größenordnungen immer noch eine sinnvolle Näherung der Funktion $f(x)$ für kleine Funktionswerte zu erhalten, wird unterhalb des mittleren Funktionswerts

$$\bar{f} = \frac{1}{x_N - x_0} \int_{x_0}^{x_N} f(x) dx \quad (3.31)$$

statt der absoluten die Abweichung

$$\begin{aligned}\Delta_i^{\text{rel}} &= \frac{\Delta_i^{\text{abs}}}{\bar{f}_i}, \\ \bar{f}_i &= \frac{1}{x_{i+1} - x_i} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx\end{aligned}\quad (3.32)$$

relativ zum mittleren Funktionswert \bar{f}_i im Intervall i verwendet. Allerdings wird der so erhaltene Wert auf höchstens ein Tausendstel der absoluten Abweichung Δ_i^{abs} festgelegt, um die Anzahl von Stützstellen bei Funktionswerten nahe Null nicht zu stark zu erhöhen. Es gilt insgesamt:

$$\Delta_i = \begin{cases} \Delta_i^{\text{abs}}, & \bar{f}_i \geq \bar{f} \\ \Delta_i^{\text{rel}}, & 10^{-3} \cdot \bar{f} \leq \bar{f}_i < \bar{f} \\ 10^3 \cdot \Delta_i^{\text{abs}}, & \bar{f}_i < 10^{-3} \cdot \bar{f} \end{cases} \quad (3.33)$$

Im zweiten Schritt wird die Anzahl der gefundenen Stützstellen reduziert. Dazu wird jeweils eine Stützstelle fixiert und die andere solange verschoben, bis die geforderte maximale Abweichung κ im jeweiligen Intervall gerade noch eingehalten wird. Damit die Stützstellen gleichmäßig verteilt sind, wird dieser Vorgang von den Randstützstellen x_0 und x_N begonnen und in der Mitte zusammengeführt.

Der letzte Schritt besteht in einer Anpassung der Höhe y_i der Stützstellen, um die vorzeichenbehaftete Abweichung

$$\tilde{\Delta}_i = \sum_{j=1}^J w_j \cdot \left((1 - a_j) y_i + a_j y_{i+1} - f(x_i + a_j(x_{i+1} - x_i)) \right) \quad (3.34)$$

zwischen der Originalfunktion und dem linearen Polynomzug zu minimieren. Dazu wird zu jeder Stützstelle der gewichtete Mittelwert der Abweichungen addiert. Je nach Krümmung der wahren Funktion im Intervall wird die Höhe des Stützpunkts zu

$$y_i = f(x_i) - \begin{cases} \frac{f(x_i) \cdot \tilde{\Delta}_{i-1}}{f(x_{i-1}) + f(x_i)} - \frac{f(x_i) \cdot \tilde{\Delta}_i}{f(x_i) + f(x_{i+1})}, & f \text{ konvex} \\ \frac{f(x_{i-1}) \cdot \tilde{\Delta}_{i-1}}{f(x_{i-1}) + f(x_i)} - \frac{f(x_{i+1}) \cdot \tilde{\Delta}_i}{f(x_i) + f(x_{i+1})}, & f \text{ konkav} \end{cases} \quad (3.35)$$

festgelegt. Die Wichtung in Abhängigkeit der Krümmung sorgt dafür, dass bei der Höhenanpassung keine negativen Werte für die Dichtefunktion entstehen.

Durch den letzten Schritt wird die Abweichung noch einmal halbiert, sodass die Approximation mit Ausnahme der Wendepunkte eine Differenz von weniger als der Hälfte der Vorgabegenauigkeit zur wahren Funktion aufweist. Die Teilschritte des Algorithmus sind in Abbildung 3.12 beispielhaft für eine höhenverschobene Sinuswelle mit $\kappa = 0,02$ dargestellt.

In den evaluierten Wechselwirkungsdaten werden keine Unsicherheiten für Dichtefunktionen angegeben. Zur Wahl der Vorgabegenauigkeit sind daher experimentelle Daten für den Standardquerschnitt der elastischen Streuung an Kohlenstoff im Energiebereich 3 – 9 MeV herangezogen worden [52], [53]. Die Messunsicherheit der differentiellen Wirkungsquerschnitte beträgt dort etwa 5%. Die zitierten Experimente werden in den Bibliotheken ENDF/B-VII [13] und JEFF-3.1.1 [12] in diesem Energiebereich als Grundlage der Evaluation verwendet und stellen damit den aktuellen Wissensstand dar. Um die numerische Abweichung der Approximation klein gegen die Messunsicherheit zu halten, ist daher für die Umwandlung der Wechselwirkungsdaten eine Vorgabegenauigkeit von $\kappa = 0,01 \cdot \bar{f}$ verwendet worden.

Beispielhaft ist in die linearisierte Form der bereits in Abbildung 3.3 vorgestellten elastischen Richtungsichte für elastische Streuung an Kohlenstoff für Neutronen der Energie $E = 6$ MeV dargestellt. Die Approximation verwendet 28 Stützstellen und weicht absolut um weniger als $3 \cdot 10^{-3}$ von der wahren Dichtefunktion ab.

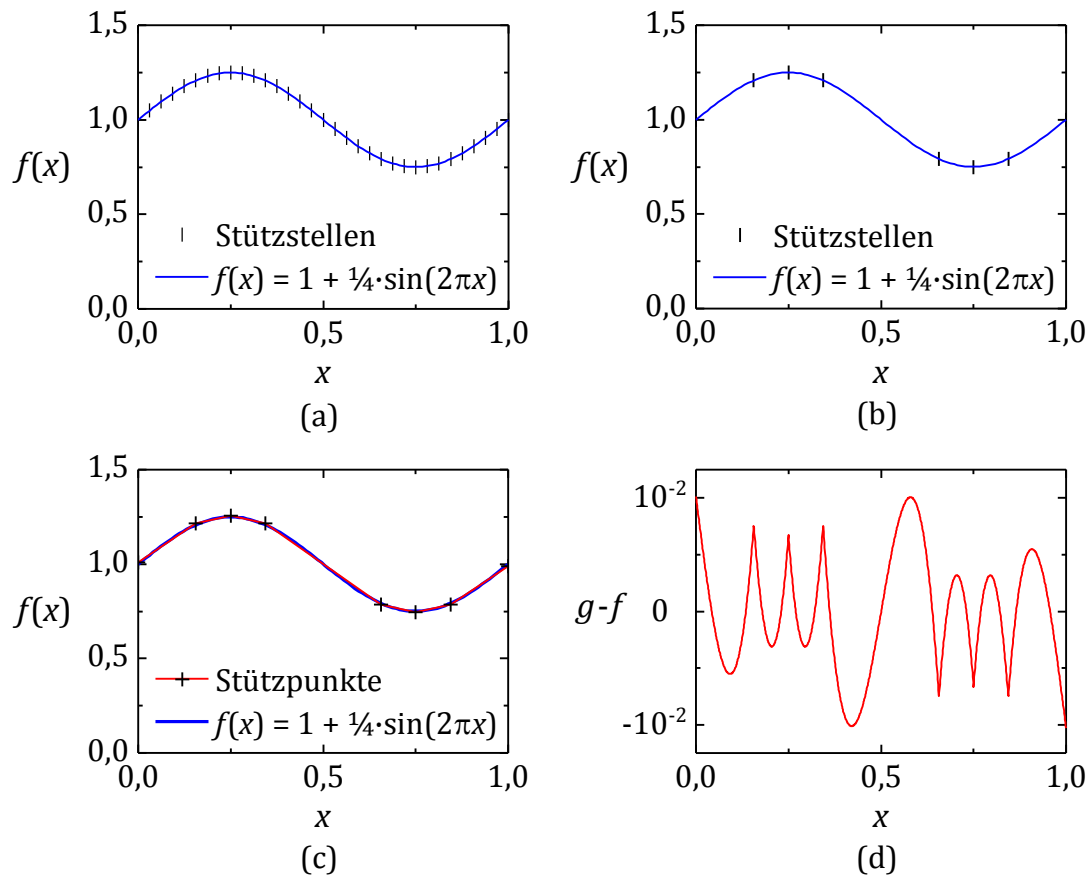


Abbildung 3.12: Schematischer Ablauf zur Stützpunktwahl einer vorgegebenen Funktion. (a): Wahl dichter Stützstellen. (b): Ausdünnen der Stützstellen. (c): Optimierung der Stützpunkthöhe. (d): Abweichung zur Originalfunktion.

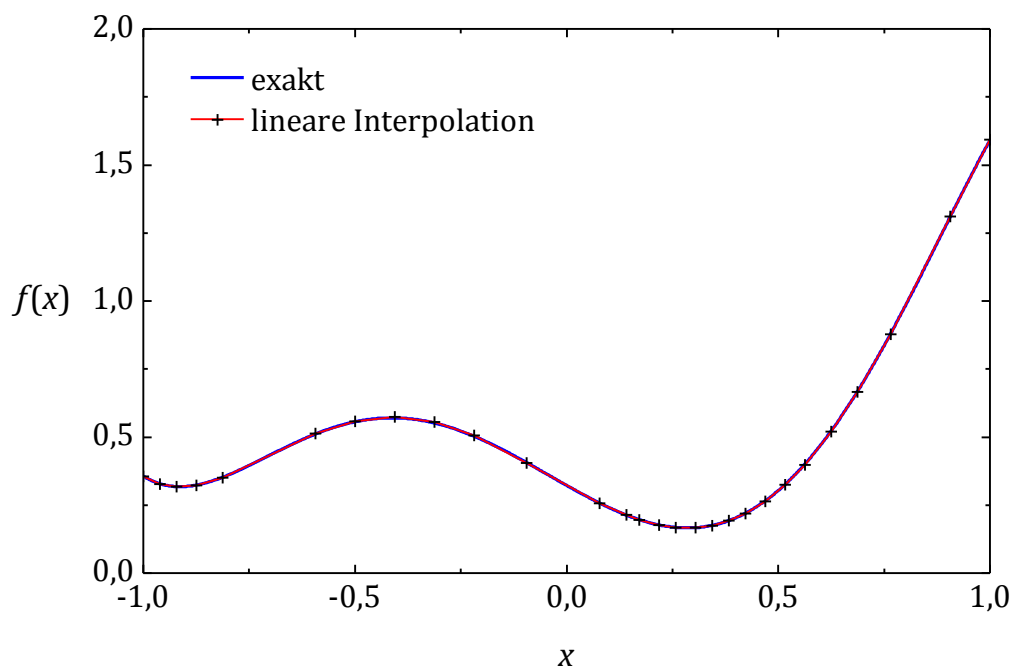


Abbildung 3.13: Richtungsdichte und linearisierte Darstellung für elastische Streuung von 6 MeV Neutronen an Kohlenstoff.

3.2.5 Darstellung zweidimensionaler Dichtefunktionen

Zur Bearbeitung der Energie-Richtungsichte als zweidimensionaler Dichtefunktion muss das vorgestellte Verfahren erweitert werden. Da es für das Erheben von Stichproben aus mehrdimensionalen Dichtefunktionen keine allgemeingültigen effizienten Verfahren gibt, wird die bereits in den evaluierten Daten vorhandene Faktorisierung (3.5) in eine Randdichte der Sekundärenergie $f(E, E')$ und zu jedem Energiewert bedingte Richtungsichtefunktionen $g(E, \mu|E')$ beibehalten.

Im ersten Schritt der Linearisierung werden geeignete Stützstellen der Energiedichte gewählt, um die Abweichung der Energiedichte wie im eindimensionalen Fall auf unter 10% des Vorgabewertes κ zu verringern. Wenn die Daten in Form einer kombinierten Energie-Richtungsichte vorliegen, ist diese bereits in Form einer tabellierten Stützstelle gegeben. Liegen Energie- und Richtungsichtefunktionen unabhängig voneinander vor, so erfolgt die Wahl der Energiestützstellen wie im eindimensionalen Fall.

Zu jeder Energiestützstelle wird im zweiten Schritt die Richtungsichtefunktion $g(E, \mu|E')$ nach obigem Algorithmus mit 10% der Vorgabegenauigkeit κ linearisiert. Anschließend wird die Anzahl von Energiestützstellen soweit wie möglich verringert. Dabei soll sowohl der Abweichung zwischen originaler und interpolierter Energieranddichte $f(E, E')$ als auch die Abweichung der zugehörigen bedingten Richtungsichtefunktionen $g(E, \mu|E')$ jeweils für konstante μ -Werte unter der Vorgabegenauigkeit κ liegen. Nach Anpassung der Stützpunkthöhe liegt die Energiedichte in der linear interpolierten Form

$$f(E, E') = \begin{cases} 0, & E' < E'_0 \\ y_i \cdot \frac{E'_{i+1} - E'}{E'_{i+1} - E'_i} + y_{i+1} \cdot \frac{E' - E'_i}{E'_{i+1} - E'_i}, & E'_i \leq E' < E'_{i+1} \\ 0, & E' > E'_N \end{cases} \quad (3.36)$$

vor. Aus den bedingten Richtungsichtefunktionen benachbarter Energiestützstellen E'_i und E'_{i+1} wird im vorletzten Schritt jeweils eine mittlere bedingte Dichtefunktion

$$g(E, \mu|i) = g(E, \mu|E'_i) \cdot \frac{y_i}{y_i + y_{i+1}} + g(E, \mu|E'_{i+1}) \cdot \frac{y_{i+1}}{y_i + y_{i+1}} \quad (3.37)$$

bestimmt. Deren Stützpunkte werden im letzten Schritt ebenfalls ausgedünnt und angepasst. Beispielhaft ist in Abbildung 3.14 die Aufbereitung der in Abbildung 3.5 vorgestellten Energie-Richtungsichte der ${}^7\text{Li}(n, 2n)$ -Reaktion für eine Primärenergie von $E = 14$ MeV in Energieranddichte und bedingte intervallgemittelte Richtungsichten dargestellt. In der Praxis wird die Dichtefunktion vor dieser Aufbereitung noch bezüglich der zugehörigen Primärenergiegruppe gemittelt.

Im Schwerpunktsystem angegebene Energie-Richtungsichten müssen vor der Verarbeitung zunächst mittels Lorentz-Transformation ((2.107) bis (2.109)) ins Laborsystem transformiert werden. Dazu wird die Dichtefunktion für ein festes Raster von Laborenergie- und -richtungskosinus-Stützstellen berechnet, und dazwischen lineare Interpolation angenommen. Für den Fall, dass die Energiedichte konstant interpoliert vorliegt,

wird die erste Stufe zuvor in ein linear ansteigendes Dreieck gleicher Fläche umgewandelt, damit bei der Transformation keine Polstelle entsteht.

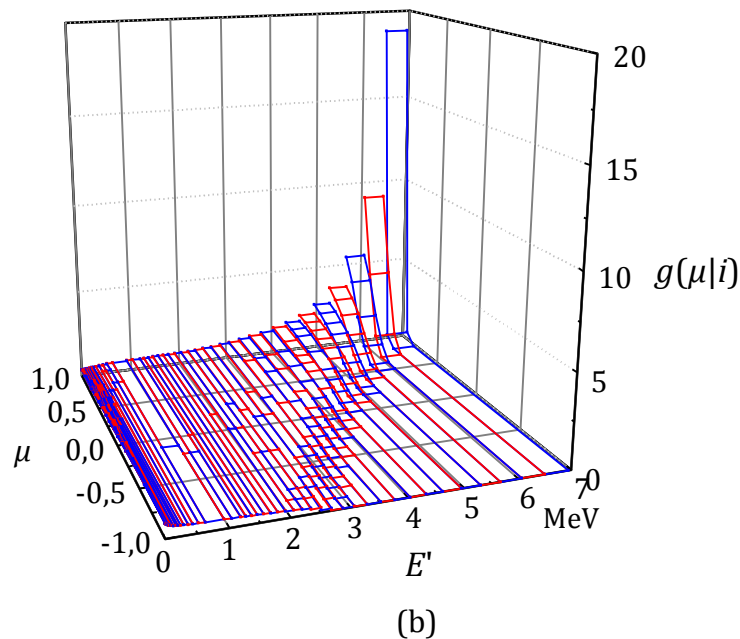
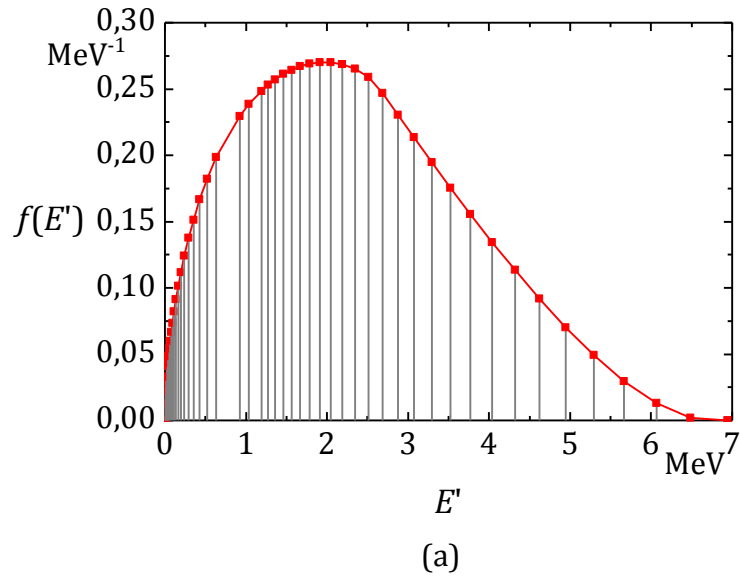


Abbildung 3.14: Aufbereitete Darstellung der Energie-Richtungsdichte der ${}^7\text{Li}(n,2n)$ -Reaktion für $E = 14$ MeV. (a): Linear interpolierte Energiedichte. (b): bedingte Richtungsichten, jeweils über ein Stützstellenintervall der Energiedichte gemittelt.

Als Energieraster werden zunächst 250 linear äquidistante Schritte im erreichbaren Energieintervall verwendet. Zur adäquaten Darstellung des niederenergetischen Bereichs wird weiterhin bis zur kritischen Energie E_{kr} (vgl. (2.110)) logarithmisch äquidistant eine Stützstelle je Duade eingefügt. Zur Erfassung der möglichen Polstelle

bei der kritischen Energie werden außerdem 12 Stützstellen in Form einer Intervallschachtelung um E_{kr} eingefügt.

Der Richtungskosinus wird in 200 Intervalle unterteilt. Da oft eine starke Vorwärtsbetonung der Streuung auftritt, werden Stützstellen der Form

$$\mu_i = 1 - \frac{i^2}{20000}, \quad i = 0 \dots 200 \quad (3.38)$$

verwendet. Die an diesen Stützstellen gewonnene zweidimensionale, tabellierte Dichtefunktion im Laborsystem kann nun mit der obigen Vorgehensweise faktorisiert und ausgedünnt werden.

Wechselwirkungsdaten chemisch gebundener Atome

Für chemische Verbindungen bestimmter Nuklide sind in einigen evaluierten Datenbibliotheken Wechselwirkungsdaten für thermische Neutronenstreuung gegeben [12], [13]. Im Gegensatz zu den Daten für freie Atomkerne sind hier jedoch nur differentielle und keine integralen Wirkungsquerschnitte enthalten. Diese müssen im Falle vollelastischer Streuungen über Gleichungen (3.9) und (3.14a) berechnet und im Falle unelastischer Streuung durch numerische Integration von (3.17) bestimmt werden. Die Trennung in zwei physikalische Prozesse wird beibehalten, da nur bei unelastischer Streuung eine Energieänderung des Neutrons auftritt.

Im vollelastischen Fall wird der Gruppenmittelwert der Richtungsichte wie im Fall elastischer Streuung durch Linearisierung und Stützstellenausdünnung bestimmt. Für den Fall unelastischer Streuung muss anhand der evaluiert gegebenen Funktion $S(\hat{k}, \hat{\omega})$ über (3.14a) zunächst der differentielle Wirkungsquerschnitt für ein nuklidabhängiges Energieraster und ein gemeinsames Winkelraster bestimmt werden. Wichtigster Parameter ist dabei eine obere Energieschwelle E_{max} für die thermische Bewegungsenergie des Atomkerns. Es wird derjenige Wert gewählt, welcher nach Maxwell-Boltzmann-Statistik mit einer Wahrscheinlichkeit von weniger als 10^{-10} überschritten wird. Dies entspricht einer Energie von etwa $25 k_B T$.

Als Energiestützstellen werden zunächst die Gruppengrenzen des Wirkungsquerschnitts verwendet. Oberhalb der Energie, bei welcher die Gruppenbreite den Wert

$$\Delta E = \frac{E}{40 + 20 \cdot \sqrt{\frac{E}{E_{\text{max}}}}} \quad (3.39)$$

überschreitet, werden weitere Stützstellen mit Abstand ΔE bis zur Primärenergie E eingefügt. Oberhalb davon nehmen die Stützstellen

$$E_i = E + \Delta E \cdot i + 0,05 \cdot \Delta E \cdot i \cdot (i + 1) \quad (3.40)$$

zunächst quadratisch bis $E + 0,16 E_{\text{max}}$ zu. Bis $E + E_{\text{max}}$ wird die Schrittweite dann exponentiell vergrößert. Diese Einteilung ist als Kompromiss zwischen Detailtreue und Rechenaufwand gefunden worden. Als Winkeleinteilung wird (3.38) verwendet. Für die

Gruppierung und Ausdünnung der doppeltdifferentiellen Wirkungsquerschnitte wird analog zu den Energie-Richtungsdichten bei Kernreaktionen vorgegangen.

Als Beispiel für die detaillierten Daten ist in Abbildung 3.15 die faktorisierte gruppengemittelte Energie-Richtungsdichte der unelastischen thermischen Streuung an Wasserstoff in Polyethylen für die Energiegruppe um 40 meV dargestellt.

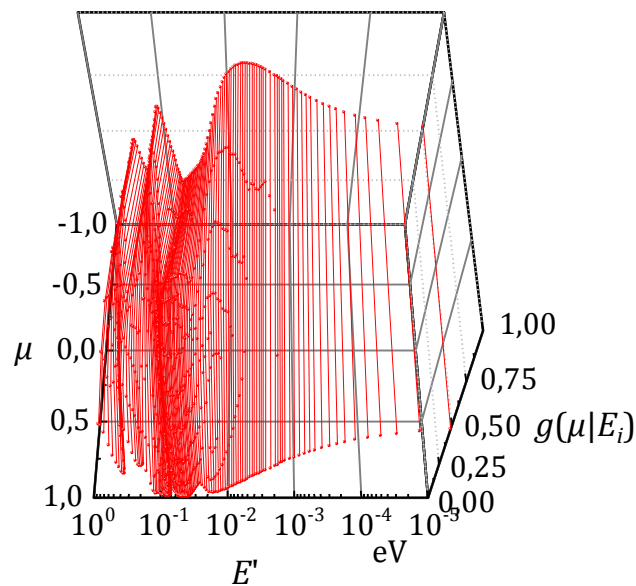
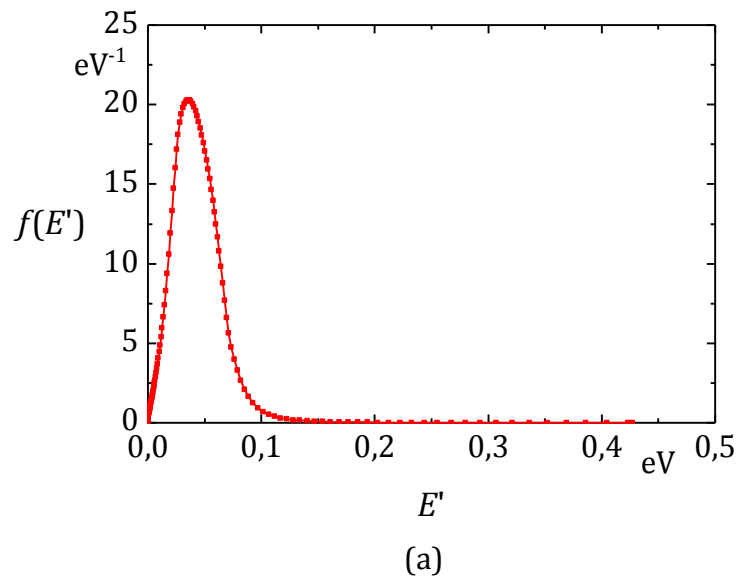


Abbildung 3.15: Aufbereitete Darstellung der Energie-Richtungsdichte der unelastischen Streuung an Wasserstoff in PE für $E \approx 40 \text{ meV}$. (a): Linear interpolierte Energiedichte. (b): bedingte Richtungsichten, jeweils über ein Stützstellenintervall der Energiedichte gemittelt.

3.3 Neutronentransportalgorithmus

3.3.1 Vorhandene Infrastruktur

Grundlage für den zu implementierenden Neutronentransportalgorithmus ist das bereits seit 1989 an der TU Dresden entwickelte Strahlungstransportprogramm AMOS⁷ [10], [11], [54]- [61]. Es ermöglicht die Lösung der stationären Strahlungstransportgleichung für allgemeine dreidimensionale Geometrien. Das bisherige Einsatzgebiet ist die Simulation natürlicher Radionuklidquellen in dosimetrischen, technischen und medizinischen Anwendungen. Die Berechnung umfasst den gekoppelten Transport von Photonen mit Elektronen und Positronen. Durch die Berücksichtigung zeitlicher Korrelationen in den Abregungskaskaden der Radionuklide und eine detaillierte Simulation von Schalenrelaxationen kann eine spektrometrische Genauigkeit erreicht werden. So konnte beispielsweise das Pulshöhenspektrum eines hochreinen Germaniumdetektors simuliert werden [11].

Die Initialisierung und Steuerung des Programmablaufs erfolgt durch den Manager. Hier werden zunächst die Konfigurationsdaten der Simulation eingelesen und die notwendigen Datenstrukturen eingerichtet. Eine Simulation besteht aus mehreren Batches, in denen jeweils eine gewisse Anzahl von Stichproben berechnet wird. In Abbildung 3.16 ist der schematische Programmablauf einer Simulation in AMOS nach der Initialisierung dargestellt.

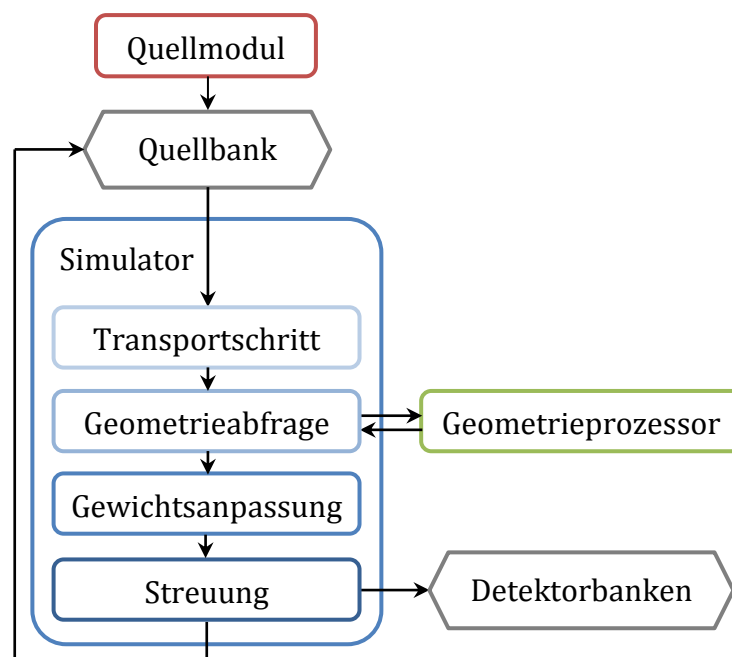


Abbildung 3.16: Schematischer Programmablauf im Strahlungstransportprogramm AMOS.

Im Quellmodul werden Teilchenart, Energie, Richtung und Ort der Quelldichtestichproben festgelegt. Neben der Erhebung von einzelnen Stichproben zu jeder Teilchenart ist eine Simulation von radioaktiven Umwandlungen mitsamt allen nachfolgenden Abre-

⁷ Allgemeiner Monte-Carlo-Strahlungstransport

gungskaskaden möglich. Als Quellsörper stehen neben Punktquellen auch Oberflächen und Volumen von Quadern, Kugeln und Zylindern sowie Voxelquellen zur Verfügung. Die Emissionsrichtung ist wahlweise normal zur Oberfläche oder isotrop. Für Teilchen können diskrete Energien sowie konstant, linear oder kubisch interpolierte Spektren angegeben werden.

Die pro Batch erzeugten N_B Stichproben der Quellteilchendichte $s_{E\Omega}$ werden je nach Teilchenart in einer separaten Quellbank abgelegt. Die Quellbanken können auch Stichproben der Emissionsratendichte höherer Stoßordnungen χ_i enthalten. Der Manager ruft nacheinander die Transportmodule (Simulatoren) aller Teilchenarten auf. Diese verarbeiten alle Stichproben in der jeweiligen Quellbank. Aus einer Stichprobe der Emissionsratendichte χ_i wird nach der Iterationsvorschrift in (2.35) zunächst eine Stichprobe der Stoßratendichte i ter Stoßordnung ζ_i bestimmt, indem ein exponentialverteilter Transportschritt durchgeführt wird. Für den neuen Wechselwirkungsort wird das zugehörige Material bestimmt und ein eventueller Abbruch durch Verlassen der Geometrie geprüft. Für gültige Stichproben ζ_i wird nach (2.36) jeweils eine Stichprobe des Stoßintegrals erhoben. Im Streuintegral eventuell erzeugte Stichproben von Sekundärteilchen werden in die entsprechende Quellbank abgelegt. Ein Abbruch der Iteration erfolgt im analogen Fall durch eine Absorptionsreaktion, im nichtanalogen Fall durch Unterschreiten eines Grenzwerts für das Stichprobengewicht.

Zur Berechnung der gewünschten physikalischen Größe sind spezielle Detektormodule vorhanden. Für einfache Stoßpunktschätzer wird zu jeder Stichprobe der Stoßratendichte ein Beitrag in der jeweiligen Detektorbank abgelegt. Dies betrifft beispielsweise die Bestimmung einer spektralen Flussdichte oder Reaktionsrate. Die im Vergleich zu den alternativ einsetzbaren Spurlängenschätzern geringere statistische Effizienz wird durch den Verzicht auf die Berechnung von Schnittpunkten mit Materialoberflächen mehr als ausgeglichen.

Beiträge zu Stoßprozessschätzern wie etwa Energiedepositionsschätzern werden jeweils aus den Stichproben der Stoßratendichte i ter Stoßordnung und der Emissionsratendichte $(i + 1)$ ter Ordnung bestimmt. Im Programm stehen integrale Schätzer zur Bestimmung der Energiedosis sowie Pulshöhenschätzer zur Simulation von energieführenden Detektoren zur Verfügung.

Nach einem Durchlauf aller Simulatoren werden die gesammelten Beiträge in den Detektoren zunächst vorverarbeitet, indem sie bezüglich der Detektorvolumina und eventuell der Energie vorsortiert werden. Am Ende eines Batches liegt eine Stichprobe der zu bestimmenden Größe als Summe aller Beiträge vor. Ab zwei Batches wird auch die zugehörige Stichprobenvarianz bestimmt.

Das Programm endet entweder nach einer vorgegebenen Anzahl an Batches oder wenn der Schätzwert des Variationskoeffizienten eines ausgewählten Schätzers einen vorgegebenen Wert unterschreitet.

Die Zuordnung vom Ort zum zugehörigen Material findet im Geometriemodul statt. Dabei kommt alternativ eine kombinatorische Geometrie oder eine Voxelgeometrie zum Einsatz. In der kombinatorischen Geometrie wird das Volumen der Simulation sukzessive durch Innen-/Außen-Entscheidungen an zweidimensionalen Flächen in Untervolumina zerlegt. Die Unterteilung erfolgt im Gegensatz zu vergleichbaren Transportprogrammen über einen binären Baum. Dies geht einher mit einem speziellen Algorithmus zur Bestimmung des nächsten Stoßpunktes, welcher im folgenden Abschnitt vorgestellt wird.

3.3.2 Programmablauf im Neutronensimulator

Zunächst wird anhand des Ortes und der Energie überprüft, ob für die jeweilige Stichprobe der Emissionsratendichte i ter Ordnung in der Quellbank überhaupt ein Transport notwendig ist. Liegt die Stichprobe außerhalb der Problemgeometrie, oder ist die Energie niedriger als der Transportschwellwert, so wird die Iteration abgebrochen.

Andernfalls wird wie im folgenden Unterabschnitt beschrieben eine Stichprobe des Transportintegrals bestimmt. Liegt die erhaltene Stichprobe ζ_i der Stoßratendichte i ter Stoßordnung im gültigen Medium k , so werden gegebenenfalls Beiträge zu vorgegebenen Stoßpunktschätzern abgelegt. Dies gilt auch für eventuelle virtuelle Zwischenstoßpunkte.

An echten Stoßpunkten wird zunächst über die Absorptionswahrscheinlichkeit $P_a^{(k)}$ nach (3.21) die Verringerung des Stichprobengewichts durchgeführt. Dabei ist entweder ein Abbruch der Iteration mit Wahrscheinlichkeit $P_a^{(k)}$ oder eine Multiplikation zwischen Stichprobengewicht und der komplementären Wahrscheinlichkeit $(1 - P_a^{(k)})$ möglich. Der erste Fall entspricht einem analogen Strahlungstransport. Der zweite Fall stellt einen nichtanalogen Transportalgorithmus dar.

Ist die Iteration nicht durch Absorption beendet worden, so wird anschließend aus den Reaktionswahrscheinlichkeiten $\{P_{lm}\}$ eine Stichprobe des aktiven Nuklids l sowie der stattfindenden Wechselwirkung m erhoben. Die Bestimmung einer Stichprobe des Stoßintegrals (2.36) wird im übernächsten Unterabschnitt näher beschrieben. Das Ergebnis ist eine Stichprobe für die nächsthöhere Emissionsratenordnung χ_{i+1} am selben Ort, aber mit neuer Energie und Richtung.

Die Energiedifferenz zwischen Stoß- und Emissionsratendichte sowie die kinetische Energie der entstehenden geladenen Teilchen werden als Beitrag zum Energiedepositionsschätzer gespeichert. Eine eventuelle Anregungsenergie des Produktkerns wird in dieser Arbeit ignoriert. Diese würde mit großer Wahrscheinlichkeit in Form hochenergetischer Photon mit großer Reichweite freigesetzt und somit das betrachtete Volumen in den meisten Fällen verlassen.

Für die erhaltene Stichprobe der Emissionsratendichte $(i + 1)$ ter Ordnung wird die Energiegruppe j bestimmt und anschließend der nächste Transportschritt ausgeführt. Die Iteration erfolgt solange, bis eine Stichprobe außerhalb der Geometrie liegt oder ein

Abbruch durch Absorption bzw. durch Unterschreiten einer Energie- oder Gewichtsschwelle erfolgt.

Um einen möglichst effizienten Programmablauf zu gewährleisten, wird dieser Algorithmus in verschiedenen Ausführungen angelegt. Dabei wird unterschieden:

- ob eine Simulation von thermischer Neutronenstreuung durchgeführt werden soll
- ob die Simulation analog oder nichtanalog erfolgen soll
- ob eine Fluenzschätzung, eine Reaktionsratenschätzung und/oder eine Energiedepositionsschätzung erwünscht ist

Dazu wird die Programmroutine in C++ als Funktion mit mehreren Boole'schen Template-Parametern angelegt. Die Funktion wird dadurch für alle Kombinationen von Wahrheitswerten vom Compiler erzeugt, wodurch unnötige Operationen vermieden werden können. Bei der Initialisierung des Programms wird einmalig die gewünschte Funktion ausgewählt.

Stichproben des Transportintegrals

Stichproben des Transportintegrals (2.35) lassen sich über einen inhomogenen Poissonprozess mit der ortsabhängigen Wirkungsquerschnittsdichte $\Sigma_t^{(j)}(\mathbf{r})$ der Energiegruppe j als Reaktionsrate modellieren. Alle dem Autor bekannten aktuellen Programme verwenden dazu die Methode der Schnittpunktberechnung mit der Materialoberfläche [4]- [9].

Dabei wird wie in Abbildung 3.17 (a) dargestellt jeweils der Schnittpunkt der Bewegungsgerade mit der nächsten Oberfläche berechnet. Mit der mittleren freien Weglänge des aktuellen Materials wird eine Stichprobe des wechselwirkungsfreien Weges erzeugt. Liegt die Stichprobe innerhalb des Materials, wird diese als neuer Stoßpunkt verwendet. Andernfalls wird das Teilchen bis zur Oberfläche transportiert und von dort aus der Algorithmus mit der mittleren freien Weglänge des neuen Mediums wiederholt.

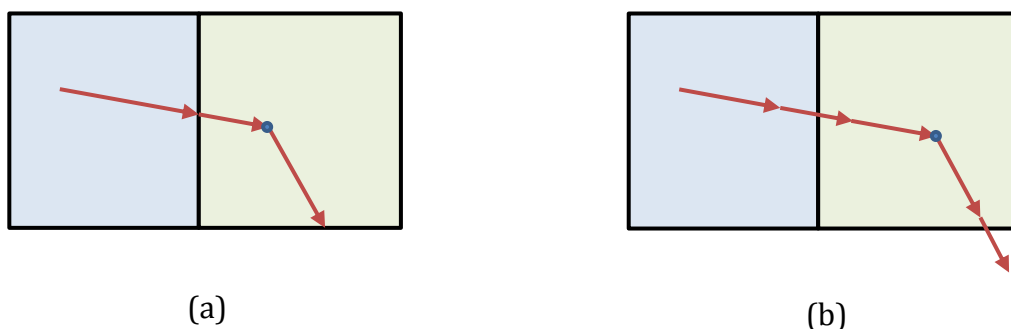


Abbildung 3.17: Erhebung von Stichproben des Transportintegrals mit (a) Schnittpunktberechnung oder mit (b) der Methode der virtuellen Stoßpunkte.

In AMOS wird hingegen unabhängig vom Ort zunächst ein exponentiell verteilter wechselwirkungsfreier Weg mit der minimalen in der Anordnung vorhandenen mittleren freien Weglänge $\Lambda_m^{(j)}$ erhoben [58]. Schematisch ist dies in Abbildung 3.17 (b)

dargestellt. Für den neuen potentiellen Stoßpunkt wird das Material k und die zugehörige totale Wirkungsquerschnittsdichte $\Sigma_t^{(k,j)}$ ermittelt. Über diesen Wert wird mit

$$P_r^{(k,j)} = \Lambda_m^{(j)} \cdot \Sigma_t^{(k,j)} = \frac{\Sigma_t^{(k,j)}}{\max_h \{\Sigma_t^{(h,j)}\}} \quad (3.41)$$

die Wahrscheinlichkeit bestimmt, mit welcher der Ort als realer Stoßpunkt akzeptiert wird. Für die verworfenen, sogenannten virtuellen, Stoßpunkten wird der Algorithmus wiederholt [21], [26], [62]. Das Verfahren wird als Methode der virtuellen Stoßpunkte oder Methode der Nullstöße bezeichnet.

Im klassischen Verfahren müssen für jeden Transportschritt die Schnittpunkte der verlängerten Trajektorie mit allen Oberflächen der Transportgeometrie durchgeführt werden, um den nächsten Schnittpunkt der Trajektorie zu bestimmen. Diese Berechnungen nehmen bei Transportrechnungen mit vielen, insbesondere gekrümmten, Oberflächen einen großen Teil der Rechenzeit ein.

Im Gegensatz dazu muss beim Verfahren der virtuellen Stoßpunkte nur von den Koordinaten des Stoßpunkts auf das aktuelle Material geschlossen werden. Dies erfolgt durch direktes Einsetzen in die Oberflächengleichungen aller Materialoberflächen. In AMOS wird die Zuordnung zu einem Material durch Verwendung eines binären Baums zusätzlich beschleunigt. Dabei wird die Transportgeometrie durch eine Hierarchie von Oberflächen in immer kleinere Untervolumen zerteilt. Die Anzahl von Abfragen, um einen Punkt zu einem Volumen zuzuordnen, wächst lediglich mit dem Logarithmus der Anzahl von Oberflächen, sodass auch in komplizierten Geometrien nur wenige Abfragen zur Bestimmung des Materials notwendig sind.

Weiterhin liefern die virtuellen Stoßpunkte zusätzliche Stichproben der Stoßratendichte. Dadurch können die vorhandenen Stoßpunktschätzer, etwa zur Bestimmung der Fluenz, insbesondere auch im Vakuum eingesetzt werden.

Stichproben des Neutronenstoßintegrals

Mit Kenntnis der anhand der Reaktionswahrscheinlichkeiten P_{lm} bestimmten zu simulierenden Reaktion m am Nuklid l wird jeweils Energie und Richtungskosinus des gestreuten Neutrons bestimmt. Anschließend wird daraus nach dem in Anhang B beschriebenen Verfahren die neue Richtung des Neutrons bestimmt.

Im Falle elastischer oder inelastischer Streuung wird zunächst mit der in Abschnitt 3.3.4 vorgestellten stochastischen Trapezmethode eine Stichprobe für den Richtungskosinus im Schwerpunktsystem $\hat{\mu}$ erhoben. Dann wird mithilfe der tabellierten Transformationsparameter $o^{(j,l,m)}$, $q^{(j,l,m)}$, $s^{(j,l,m)}$ und $t^{(j,l,m)}$ der aktuellen j ten Energiegruppe die Energie des gestreuten Neutrons zu

$$E' = (o^{(j,l,m)} \cdot E + q^{(j,l,m)}) \cdot \hat{\mu} + (s^{(j,l,m)} \cdot E + t^{(j,l,m)}) \quad (3.42)$$

berechnet. Die Parameter sind so definiert, dass am Rand jeder Energiegruppe der korrekte Ausdruck (2.99) reproduziert wird. Der Richtungskosinus des gestreuten Neutrons im Laborsystem wird damit nach (2.102) berechnet.

Einen Sonderfall bildet für inelastische Reaktionen die Energiegruppe j , innerhalb derer der Schwellwert E_t liegt. Für Energien $E < E_t$ kann keine Reaktion stattfinden. Stattdessen wird die Wechselwirkung als virtueller Stoß interpretiert. Da nur im Intervall $[E_t, E_{j+1}]$ eine Streuung stattfindet, darf der Gruppenquerschnitt auch nur über dieses Intervall gemittelt werden. Für $E > E_t$ steigt der Faktor vor $\hat{\mu}$ nach (2.99) mit der Wurzel aus $E - E_t$ an. Da eine lineare Interpolation dies nicht mit genügender Genauigkeit abbilden kann, wird für die Bestimmung der Sekundärenergie E' die exakte Formel verwendet.

Im Falle thermischer Neutronen in der Näherung freien Gases wird der von Cullen vorgestellte Algorithmus zur Bestimmung von Energie und Richtungskosinus [63] verwendet. Falls Daten über Streuung an gebundenen Atomen vorliegen, können alternativ auch diese eingesetzt werden. Der Wirkungsquerschnitt liegt dabei getrennt nach voll-elastischer Streuung (ohne Energieverlust) und unelastischer Streuung vor. Für die elastische Streuung muss lediglich der neue Richtungskosinus aus tabellierten Dichtefunktionen zu (3.9) bzw. (3.14a) erhoben werden. Im Falle unelastischer Streuung wird die Energie-Richtungsdichte anhand der $S(k, \omega)$ -Näherung in (3.17) verwendet.

Zur Simulation aller anderen Kernreaktionen wird eine gemeinsame Energie-Richtungsdichte verwendet. Zunächst wird anhand der Ausbeute Y die Anzahl von zu erzeugenden Emissionsratenstichproben ausgelost. Deren Energie und Richtung werden dann sukzessive aus der gemeinsamen Energie-Richtungsdichte erhoben. Eventuelle Korrelationen zwischen den Teilchen werden dabei vernachlässigt. Da die Auswahl der Energie zufällig geschieht, ist die Energieerhaltung nur im Mittel gegeben. Die Beiträge zum Energiedepositionsschätzer können daher auch negativ werden. Eine Stichprobe wird weiter transportiert, die restlichen werden auf der Quellenbank der Emissionsrattendichte abgelegt.

Die Ausbeute könnte alternativ in Form einer Gewichtsanzpassung berücksichtigt werden. Dies führt jedoch zu einer Erhöhung des Stichprobengewichts. Stark variierende Gewichte verursachen wiederum eine erhöhte Varianz der Stoßratenstichproben und verringern damit die Effizienz der Berechnung.

Neue Detektormodule

Vor dieser Arbeit ist das AMOS-Detektormodul zur spektralen Fluenzschätzung nur für Photonen natürlicher Radionuklide im Energiebereich von etwa 1 keV bis 3 MeV vorgesehen gewesen. Die Energieintervalle besitzen dabei eine konstante Breite. Da der Neutronentransport jedoch deutlich mehr Größenordnungen umfasst, ist das Modul in dieser Arbeit erweitert worden. In der vorliegenden Version ist auch die Vorgabe logarithmisch äquidistanter Intervalle oder benutzerdefinierter Energiegrenzen möglich. Für die Zuordnung von Detektorbeiträgen in Intervalle wird der in Abschnitt 3.3.3 vorgestellte logarithmische Lookup-Algorithmus verwendet.

Daneben ist ein neues Modul für die Bestimmung von Reaktionsraten bestimmter Nuklide über einen Stoßpunktschätzer eingeführt worden. Dazu wird an jedem virtuellen Stoßpunkt im Material k ein Beitrag mit dem Gewicht

$$z = P_r^{(k)} \cdot P_{lm} \quad (3.43)$$

abgelegt. Dabei ist $P_r^{(k)}$ die Wahrscheinlichkeit eines Realstoßes und P_{lm} die Wahrscheinlichkeit, mit der die betrachtete Reaktion m am Nuklid l stattfindet. Um diese Schätzung durchzuführen, wird bei der Initialisierung der Rechnung die Wahrscheinlichkeit P_{lm} für jede Energiegruppe zusätzlich zu den Wirkungsquerschnittsdaten abgelegt.

3.3.3 Zuordnung der Energiegruppen durch ein neues Lookup-Verfahren

Durch die Verwendung einer Gruppenstruktur der Energie ist für die Simulation eine effiziente Zuordnung zwischen Energie und Gruppennummer nötig. Dies kann durch sukzessives Vergleichen, durch binäre Suche, oder mittels einer Lookup-Tabelle erfolgen. Letzteres ist bei großer Gruppenzahl die schnellste Methode [64].

Im einfachsten Fall einer linearen Lookup-Tabelle wird der Wertebereich der möglichen Teilchenenergien in N linear äquidistante Intervalle geteilt. Für jedes Intervall wird die kleinste (auch teilweise) enthaltene Energiegruppe abgelegt. Die Auswahl eines Intervalls erfolgt durch ganzzahlige Division

$$i = \left\lfloor \frac{E}{N \cdot E_{\max}} \right\rfloor \quad (3.44)$$

des Energiewerts. Innerhalb des Intervalls wird mittels binärer Suche die Gruppe bestimmt, in welcher der Energiewert liegt. Da die in dieser Arbeit verwendeten Energiegruppenstrukturen jedoch im Wesentlichen logarithmisch äquidistant sind, würde ein Großteil der Energiegruppen im ersten Lookup-Intervall liegen. Daher ist in dieser Arbeit eine neue Lookup-Funktion mit annähernd logarithmischem Raster entwickelt worden. Hierfür wird die Darstellung von Gleitkommazahlen nach dem IEEE754 Standard [65] ausgenutzt.

Eine Gleitkommazahl x besteht aus einem Vorzeichenbit s , einem Exponenten e mit Biaswert b zu einer Basis und einer Mantisse m . Allgemein wird die Darstellung

$$x = (-1)^s \cdot 2^{e-b} \cdot m, \quad \text{mit } 1 \leq m < 2 \quad (3.45)$$

mit der Basis 2 verwendet. Der Exponent ist um den konstanten Biaswert b verschoben. Dies ermöglicht die Speicherung des Wertes

$$\begin{aligned} e &= [e_{l-1} e_{l-2} \dots e_1 e_0] \\ &= \sum_{k=0}^{l-1} e_k \cdot 2^k \end{aligned} \quad (3.46)$$

als positive Ganzzahl mit l Stellen $e_k \in \{0,1\}$. Die Mantisse ist normalisiert, sodass die Ziffer vor dem Komma immer Eins beträgt. Daher werden nur die n Nachkommastellen $m_k \in \{0,1\}$ der Mantisse

$$\begin{aligned}
 m &= [1, m_1 m_2 m_3 \dots m_n] \\
 &= 1 + [0, m_1 m_2 m_3 \dots m_n] \\
 &= 1 + \sum_{k=1}^n m_k \cdot 2^{-k} \\
 &= 1 + \xi, \quad 0 \leq \xi < 1
 \end{aligned} \tag{3.47}$$

gespeichert. Für den gebrochenzahligen Teil der Mantisse wird die Bezeichnung ξ eingeführt. Zahlen mit verschwindendem ξ nehmen eine Sonderrolle ein und werden im Folgenden als Basispunkte

$$x^{(0)} = (-1)^s \cdot 2^{e-b} \tag{3.48}$$

bezeichnet. Zwischen benachbarten Basispunkten liegen die Gleitkommazahlen jeweils linear äquidistant mit einer Schrittweite von $2^{e-b} \cdot 2^{-n}$ vor.

Die in der Computerarithmetik standardmäßig verwendeten doppelt genauen Gleitkommazahlen besitzen eine Länge von 64 Bit. Davon entfallen eines auf das Vorzeichenbit, $l = 11$ Bit auf den Exponenten und $n = 52$ Bit auf die Mantisse [65]. Die Bitanordnung ist durch

$$\begin{array}{lcl}
 \text{binär:} & \boxed{s} \boxed{e_{10}} \boxed{e_9} \boxed{e_8} \boxed{e_7} \boxed{e_6} \boxed{e_5} \boxed{e_4} \boxed{e_3} \boxed{e_2} \boxed{e_1} \boxed{e_0} \boxed{m_1} \boxed{m_2} \dots \boxed{m_{52}} & \\
 \text{Bit:} & 63 & 55 \qquad \qquad \qquad 0
 \end{array} \tag{3.49}$$

gegeben. Der Biaswert b beträgt 1023.

Die vorgeschlagene Lookup-Funktion $i(x)$ ermittelt aus dieser Darstellung für positive x -Werte eine näherungsweise logarithmisch äquidistante Einteilung des Zahlenbereiches. Dazu werden die vorderen 32 Bit der Gleitkommazahl von 32 bis 63 als Ganzzahl mit binärer Darstellung $[i_{31} \dots i_0]$ interpretiert. Die Funktion kann dabei über

$$\begin{aligned}
 i(x) &= \sum_{k=0}^{31} i_k \cdot 2^k \\
 &= s \cdot 2^{31} + \sum_{k=20}^{30} e_{k-20} \cdot 2^k + \sum_{k=0}^{19} m_{20-k} \cdot 2^k \\
 &= 2^{20} \cdot \sum_{k=0}^{10} e_k \cdot 2^k + 2^{20} \cdot \sum_{k=20}^0 m_k \cdot 2^{-k} \\
 &= (e + \xi) \cdot 2^{20}
 \end{aligned} \tag{3.50}$$

ausgedrückt werden. Durch die Voraussetzung $x > 0$ gilt dabei $s = 0$. Zur Interpretation von $i(x)$ werden zunächst die Basispunkte $x^{(0)}$ betrachtet. Aus dem Zusammenhang

$$x^{(0)} = 2^{e-1023} \Leftrightarrow e = \log_2 x^{(0)} + 1023 \quad (3.51)$$

folgt mit

$$i(x^{(0)}) = e \cdot 2^{20} = (\log_2 x^{(0)} + 1023) \cdot 2^{20}, \quad (3.52)$$

dass die Funktion an den Basispunkten bis auf lineare Skalierung gerade dem dualen Logarithmus der Gleitkommazahl entspricht. Für allgemeine Gleitkommazahlen gilt entsprechend

$$x = 2^{e-1023} \cdot (1 + \xi) \Leftrightarrow e = \log_2 \frac{x}{1 + \xi} + 1023, \quad (3.53)$$

wobei $x/(1 + \xi)$ gerade dem nächstniedrigeren Basispunkt von x entspricht. Die Lookup-Funktion kann damit zu

$$i(x) = \left(\log_2 \frac{x}{1 + \xi} + 1023 + \xi \right) \cdot 2^{20} \quad (3.54)$$

zusammengefasst werden. Sie stellt also bis auf Verschiebung um 1023 und Skalierung mit 2^{20} eine stückweise lineare Approximation des dualen Logarithmus mit Stützstellen an den Basispunkten dar. In Abbildung 3.18 ist die Funktion $i(x)$ für einige Werte von x dargestellt, wobei der Abstand benachbarter Funktionswerte i jeweils konstant ist.

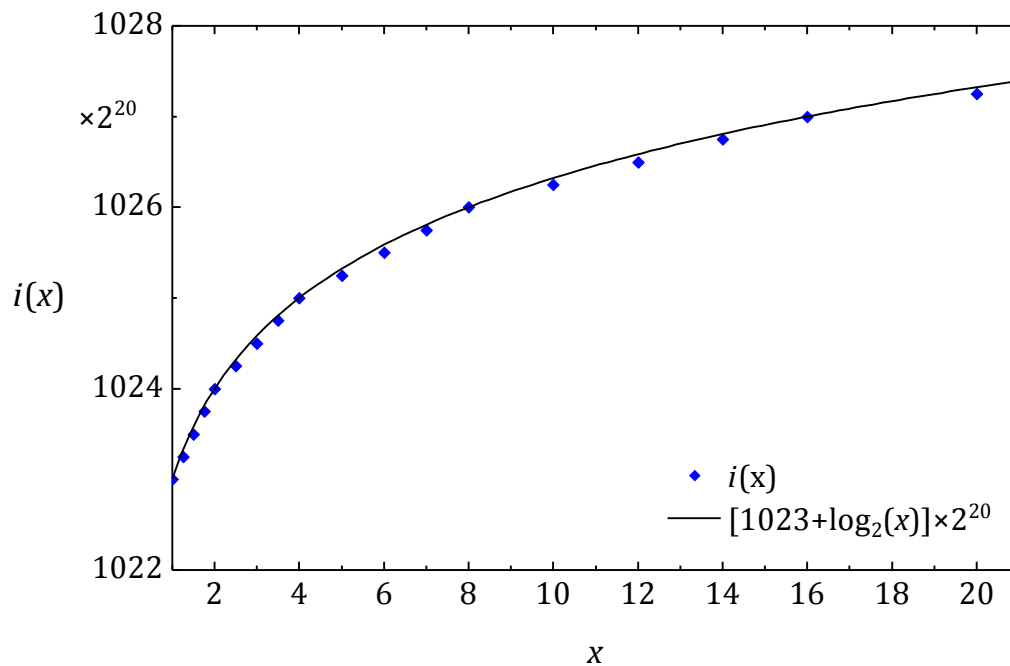


Abbildung 3.18: Werte der Lookup-Funktion für ausgewählte Gleitkommazahlen, bei denen der Abstand der Funktionswerte konstant ist. Die durchgezogene Kurve entspricht dem skalierten dualen Logarithmus.

Da die Interpretation der Gleitkommazahl als Ganzzahl keine Rechenzeit benötigt, ermöglicht dieses Vorgehen eine schnelle Einteilung eines großen Wertebereichs in ungefähr logarithmisch äquidistante Intervalle.

Zur Initialisierung des Lookup-Verfahrens für N Energiegruppen mit Minimalenergie E_{\min} und Maximalenergie E_{\max} wird zunächst der Wertebereich der Funktion $i(x)$ so linear skaliert, dass

$$\tilde{i}(E_{\min}) = 0 \text{ und } \tilde{i}(E_{\max}) = N \quad (3.55)$$

gilt. Ein Lookup-Intervall j wird jeweils durch alle Energien E definiert, für welche $\tilde{i}(E) = j$ gilt. Für jedes der Intervalle wird der Index der minimalen Energiegruppe abgelegt, welche sich (teilweise) darin befindet.

Zur Wahl der Energiegruppe bei vorgegebener Energie E wird zunächst das Lookup-Intervall durch $\tilde{i}(E)$ bestimmt. Aus der zugehörigen Minimalgruppe dieses und des nächstgrößeren Lookup-Intervalls kann über binäre Suche die korrekte Energiegruppe bestimmt werden.

Bei der Erhebung und Einordnung von Zufallszahlen zu einer Dichtefunktion $1/x$ mit $x \in [1, 10^{10}]$ in 1000 logarithmisch äquidistante Intervalle wird mit diesem Verfahren die Gesamtrechenzeit um 30% verringert. Neben der Zuordnung von Energiegruppen ist das neu entwickelte logarithmische Lookup-Verfahren auch bei der Schätzung spektraler Größen wie der Fluenz oder der Reaktionsrate implementiert worden.

3.3.4 Erheben von Stichproben mit der stochastischen Trapezmethode

In Abschnitt 3.2 wurde vorgestellt, wie die evaluierten Wechselwirkungsdaten für den Transportalgorithmus in gruppengemittelte Wirkungsquerschnitte und linear interpolierte Dichtefunktionen umgewandelt werden. Für das schnelle Erheben von Stichproben aus diesen Dichtefunktionen ist eine neue Methode entworfen worden, welche im Folgenden als stochastische Trapezmethode bezeichnet wird.

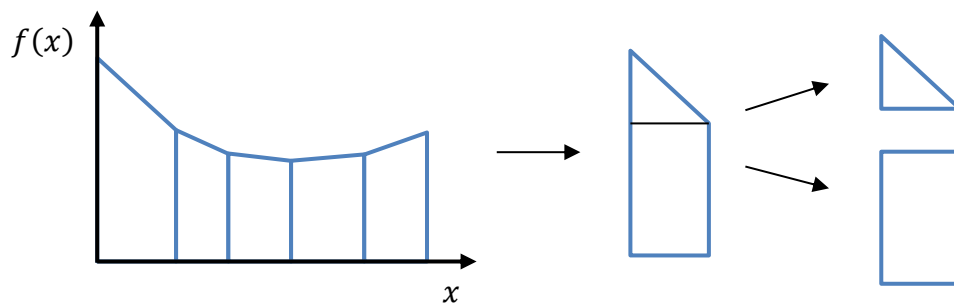


Abbildung 3.19: Zerlegung einer linear interpolierten Funktion in Rechteck- und Dreiecksdichten.

Das Grundprinzip ist in Abbildung 3.19 dargestellt. Zunächst wird ein Intervall aus zwei Stützpunkten betrachtet. Die linear interpolierte Funktion bildet hier mit der Abszisse ein rechtwinkliges Trapez. Aus dieser Dichtefunktion lassen sich Stichproben erheben,

indem mit geeigneter Wahrscheinlichkeit P_{\square} eine gleichverteilte oder mit $P_{\Delta} = 1 - P_{\square}$ eine dreiecksverteilte Zufallszahl erzeugt wird. Haben die Stützpunkte des Intervalls die Koordinaten (x_0, y_0) und (x_1, y_1) , dann folgt für die Wahrscheinlichkeiten:

$$\begin{aligned} P_{\square} &= \frac{2 \min(y_0, y_1)}{y_0 + y_1}, \\ P_{\Delta} &= \frac{|y_0 - y_1|}{y_0 + y_1}. \end{aligned} \quad (3.56)$$

Zur Erzeugung dreiecksverteilter Zufallsvariablen existieren nach Abschnitt 2.2.2 verschiedene Methoden. Neben Verwerfung und Inversion sind insbesondere die Bestimmung der betragsmäßigen Differenz zweier Zufallszahlen angelehnt an (2.62) und (2.63) oder die Bildung des Maximums zweier Zufallszahlen nach (2.64) möglich. Im Transportmodul wird die Methode der Differenzbildung verwendet, da diese sich als das schnellste Verfahren herausgestellt hat.

Stichproben aus einer linear interpolierten Dichtefunktion werden erhoben, indem zunächst mittels der in Abschnitt 2.2.2 vorgestellten Alias-Methode mit den jeweiligen Wahrscheinlichkeiten $P_i = P(x_i \leq X \leq x_{i+1})$ ein Intervall $[x_i, x_{i+1}]$ gezogen wird. Für dieses wird mit obiger Methode eine Stichprobe der enthaltenen Trapezdichte erhoben. Die Wahrscheinlichkeiten der Teilstücke P_i können wegen der Normierung der Dichtefunktion direkt aus deren Flächen

$$P_i = \frac{y_{i+1} - y_i}{2} \cdot (x_{i+1} - x_i) \quad (3.57)$$

berechnet werden.

Zu jedem Intervall wird außerdem die Stützstelle mit größerem y -Wert u_i und die gerichtete Breite d_i gespeichert.

$$\begin{aligned} u_i &= \begin{cases} x_i & y_i \geq y_{i+1} \\ x_{i+1} & y_i < y_{i+1} \end{cases} \\ d_i &= \begin{cases} x_{i+1} - x_i & y_i \geq y_{i+1} \\ x_i - x_{i+1} & y_i < y_{i+1} \end{cases} \end{aligned} \quad (3.58)$$

Für Rechtecke wird eine standardgleichverteilte Zufallszahl ξ gezogen, und die Stichprobe x der linear interpolierten Dichte $f(x)$ mittels

$$x = u_i + d_i \cdot \xi \quad (3.59)$$

bestimmt. Bei Dreiecksverteilungen werden zwei Zufallsvariablen ξ und χ gezogen und über

$$x = u_i + d_i \cdot |\xi - \chi| \quad (3.60)$$

die Stichprobe bestimmt. Durch die gerichtete Intervallbreite wird die Dreiecksverteilung korrekt ausgerichtet.

Durch die Verwendung von höchstens drei Zufallszahlen für Alias-Methode und Stichprobenbestimmung ist der Algorithmus sehr schnell. Die Initialisierung ist ebenfalls sehr effizient möglich und nimmt lediglich zwei Gleitkommazahlen für Position und Breite sowie zwei Ganzzahlen für die Wahrscheinlichkeit von Dreieck und Rechteck in jedem Intervall in Anspruch.

Der Fall mehrdimensionaler Dichtefunktion wird anhand sukzessiver Faktorisierung in Randdichten und zugehörige bedingte Dichtefunktionen behandelt. Energie-Richtungsdichten werden dabei zunächst in eine Energieranddichte und zugehörige Randdichten zerlegt. Zur Vereinfachung wird auf die Durchführung der Interpolation zwischen den Richtungsdichten verzichtet. Stattdessen wird je Energieintervall eine mittlere Richtungsdichte verwendet. Zunächst wird anhand der Randdichte ein Intervall festgelegt und darin eine Stichprobe der Energie bestimmt. Im Anschluss daran wird aus der zum Intervall gehörenden bedingten Dichtefunktion eine Stichprobe des Richtungskosinus erhoben.

Eine Verwendung des in AMOS vorhandenen angepassten Ziggurat-Algorithmus zur Erhebung von Stichproben aus Dichtefunktionen mit mehreren Extrema [30] (vgl. Abschnitt 2.2.2) wäre ebenfalls und mit ähnlicher Geschwindigkeit möglich. Allerdings muss die Funktion für eine effiziente Ausführung durch mindestens 128 Streifen überdeckt werden. Durch diesen zusätzlichen Speicheraufwand wird aufgrund der Vielzahl von zu verwendenden Dichtefunktionen für den Neutronentransport von der Benutzung dieses Verfahrens abgesehen.

4 Beispielrechnungen und Verifikation

Um die prinzipielle Funktionalität des Neutronentransportmoduls zu testen, sind einige einfache Szenarien simuliert worden. Zum Vergleich werden die Strahlungstransportprogramme MCNP 5 1.40, TART 2005 und PHITS 2.24 verwendet. Als Hardware für Vergleichsrechnungen kommt ein Fujitsu ESPRIMO Q9000 Desktop PC mit Intel® Core™ i3-350M Prozessor und 4 GB DDR3-RAM zum Einsatz.

Die Strahlungstransportrechnungen werden zur Vergleichbarkeit analog und stationär durchgeführt. Die Berechnungen mit AMOS, TART und PHITS sind vom Autor durchgeführt worden. Für MCNP sind die Ergebnisse zur Verfügung gestellt worden [66].

4.1 Transmission durch eine dünne Graphitschicht

Zur Prüfung der Wirkungsquerschnitte wird zunächst die in Abbildung 4.1 dargestellte einfache Transmissionsgeometrie simuliert. Dabei wird ein Graphitquader (Dichte $2,2 \text{ g/cm}^3$) mit Querschnittsfläche $20 \times 20 \text{ cm}^2$ und verschiedener Dicke planparallel von Neutronen mit einem gleichverteilten (weißen) Energiespektrum von 0 bis 14 MeV bestrahlt. In einem Abstand von 50 cm hinter dem Material wird im Vakuum die spektrale Fluenz der transmittierten Neutronen in einem Volumen mit Abmessungen $20 \times 20 \times 10 \text{ cm}^3$ bestimmt. Die betrachteten Schichtdicken liegen in der Größenordnung der mittleren freien Weglänge, welche für 10 MeV bis 20 MeV etwa 6 cm beträgt.



Abbildung 4.1: Skizze des betrachteten Transmissionsexperiments. Ein breites, paralleles Neutronenbündel trifft planparallel auf eine dünne Materialschicht (rot). Die transmittierte Fluenz wird in einem quaderförmigen Volumen (blau) im Vakuum geschätzt.

Das gewählte Beispiel ist angelehnt an ein experimentelles Verfahren zur Bestimmung des totalen Wirkungsquerschnitts [67]. Wenn die zu durchdringende Schicht dünn gegen die mittlere freie Weglänge und der Raumwinkel des Detektors klein bezüglich der Materialschicht ist, wird die transmittierte Fluenz im Wesentlichen durch eine exponentielle Abschwächung mit dem totalen Wirkungsquerschnitt bestimmt. Umgekehrt kann daher durch Bestimmung der Transmission auf den Wirkungsquerschnitt rückgeschlossen werden. Allerdings tritt durch gestreute Neutronen eine Erhöhung des Messwerts auf, welche zur Bestimmung des Wirkungsquerschnitts korrigiert werden muss. Die Höhe dieser Streukorrektur kann beispielsweise durch die beschriebene Monte-Carlo-Simulation bestimmt werden.

In Abbildung 4.2 sind die mit dem neu erstellten Neutronentransportmodul von AMOS mit 10^9 Quellstichproben berechneten spektralen Fluenzen für verschiedene Schichtdi-

cken dargestellt. Die Intervallbreite beträgt 40 keV. Die exponentielle Abschwächung der Fluenz ist jeweils als durchgezogene schwarze Kurve dargestellt.

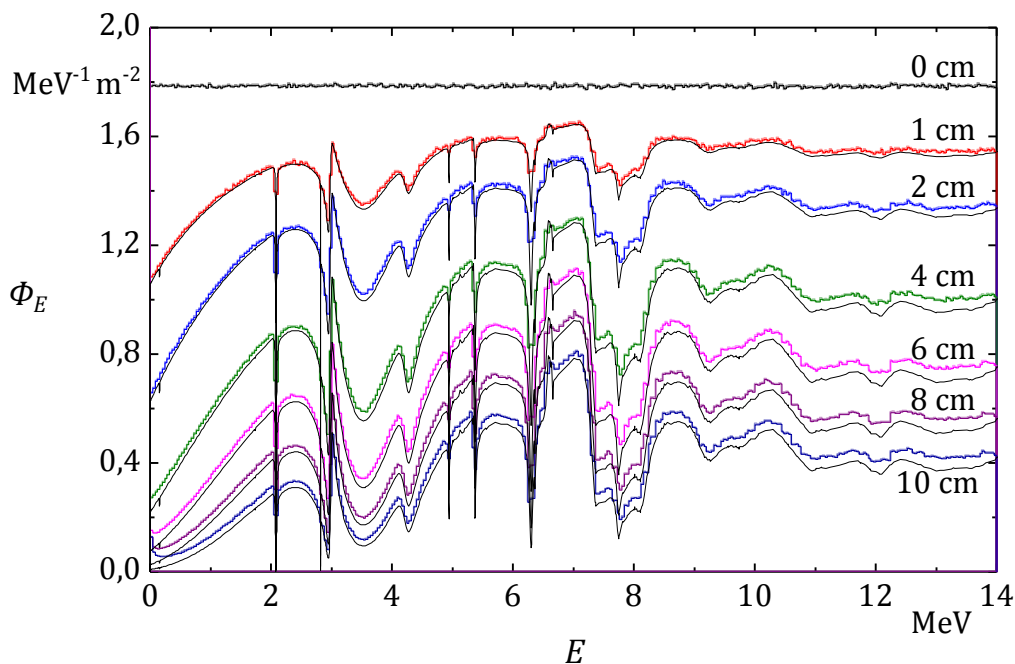


Abbildung 4.2: Spektrale Neutronenfluenz hinter einer planaren Graphitschicht verschiedener Materialdicke. Die schwarzen durchgezogenen Linien entsprechen reiner exponentieller Abschwächung mit der totalen Wirkungsquerschnittsdichte.

Im Allgemeinen stimmt der Verlauf der spektralen Fluenz gut mit der analytischen Lösung exponentieller Schwächung überein. Aufgrund eingestreuter Neutronen ist die berechnete spektrale Fluenz durchgehend etwas höher. Bei Energien größer 10 MeV und höheren Schichtdicken wird die Abweichung stärker. Durch zunehmende Vorwärtsbetonung der Richtungsichten durchqueren mehr gestreute Neutronen das Detektorvolumen. Andererseits wird auch eine Stufenstruktur der spektralen Fluenz sichtbar. Diese wird durch die Gruppenstruktur der verwendeten Wirkungsquerschnitte hervorgerufen, deren Gruppenbreite teilweise mehr als 40 keV beträgt.

Zum Vergleich ist in Abbildung 4.3 die berechnete spektrale Fluenz für 10 cm Schichtdicke unter Verwendung einer linearen Gruppenstruktur von 10 keV Breite dargestellt. Die spektrale Fluenz ist deutlich glatter und die Resonanzen zwischen 6 MeV und 7 MeV sind stärker ausgeprägt. Bei der Simulation schneller Neutronen mit hoher Energieauflösung ist daher die Verwendung linear aufgelöster Gruppendaten empfehlenswert. Für ein integrales Ergebnis spielt die Gruppierung eine geringe Rolle, da die gemittelten Wirkungsquerschnitte zu einer näherungsweise korrekten Fluenz je Energiegruppe führen. Eine genauere Diskussion erfolgt in Abschnitt 4.2.

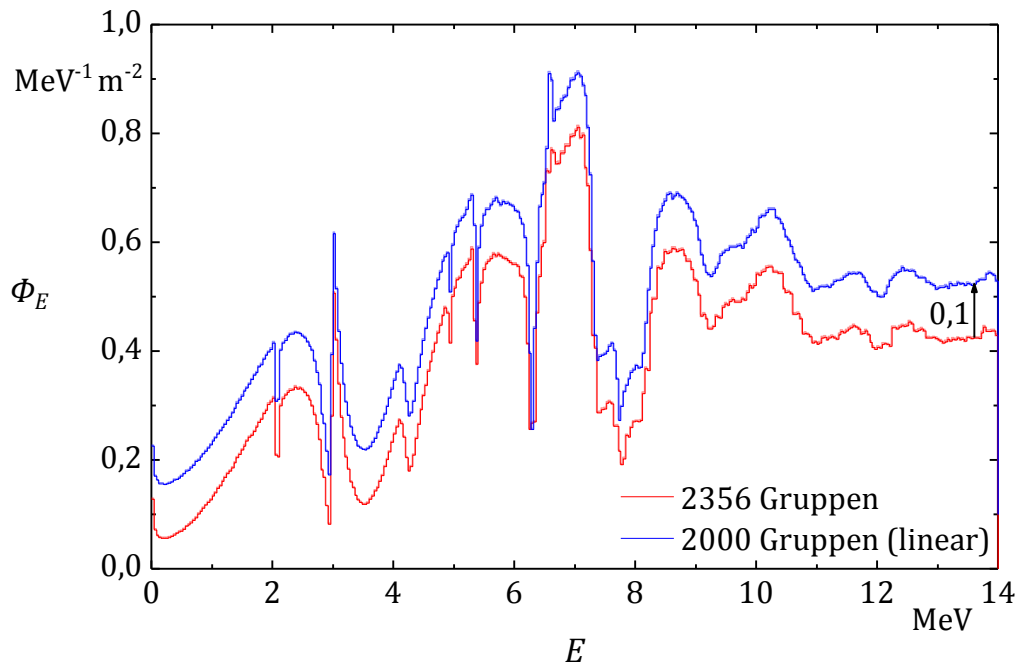


Abbildung 4.3: Spektrale Neutronenfluenz hinter einer planaren Graphitschicht von 10 cm Dicke für zwei verschiedene Energiegruppenstrukturen. Zur besseren Vergleichbarkeit ist die blaue Kurve nach oben verschoben.

In Abbildung 4.4 sind die Ergebnisse verschiedener Strahlungstransportprogramme für eine Schichtdicke von 10 cm für jeweils 10^9 Quellstichproben dargestellt.

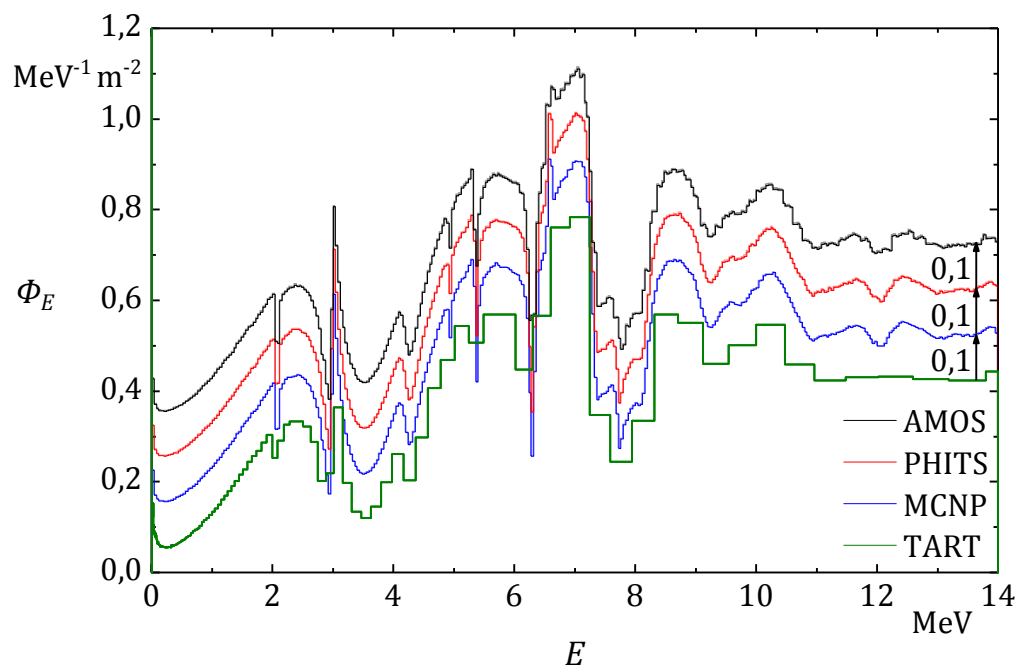


Abbildung 4.4: Spektrale Teilchenfluenz nach Transmission durch 10 cm Graphit für verschiedene Strahlungstransportprogramme. Zur besseren Vergleichbarkeit sind die Kurven jeweils gegeneinander verschoben worden.

Die spektrale Fluenz ist mit einer Intervallbreite von 40 keV bestimmt worden. Eine Ausnahme bildet TART, welches spektrale Schätzungen nur gemäß der verwendeten Energiegruppenstruktur von 50 je Dekade zulässt und daher über einen weiten Energiebereich eine geringere Auflösung aufweist. Davon abgesehen stimmen die Spektren gut überein. Da dies bei den anderen Schichtdicken ebenfalls der Fall ist, ist auf eine grafische Darstellung verzichtet worden.

Die Transportprogramme AMOS, MCNP und PHITS geben Unsicherheiten für jede Energiegruppe an. Diese sind im Diagramm als eingefärbte Bereiche um die Kurve eingetragen. In AMOS und MCNP wird die statistisch geschätzte Standardabweichung bzw. der Variationskoeffizient ausgegeben. PHITS gibt ebenfalls einen Variationskoeffizienten an, welche jedoch unter Annahme einer Poisson-Statistik lediglich aus der Wurzel der Anzahl von Beiträgen bestimmt wird. Dies führt bei nichtanaloger Rechnung oder stark variierendem Wirkungsquerschnitt je Gruppe zu einer deutlichen Unterschätzung der Unsicherheit. In TART wird jeweils nur die Standardabweichung zur integralen Strahlungsfeldgröße Fluenz bestimmt.

In Tabelle 4.1 sind die Teilchenfluenz, die Laufzeit der verschiedenen Simulationen und die Leistungszahl für die Transmission durch 10 cm Graphit dargestellt. Alle Simulationen sind analog durchgeführt worden. In TART ist die Multi-Band-Näherung aktiviert worden.

	AMOS	PHITS	MCNP	TART
Laufzeit je 10^6 Neutronen in s	1,2	12	9,8	2,2
Fluenz in 10^{-4} cm^{-2}	5,4431	5,4620	5,4614	5,4475
Unsicherheit in 10^{-4} cm^{-2}	0,0015	0,0012	0,0004	0,0010
Leistungszahl in 10^4 s^{-1}	12,4	1,79	2,89	16,2

Tabelle 4.1: Laufzeit, integrales Ergebnis und Leistungszahl der Fluenz von Neutronen nach 10 cm Graphit für verschiedene Strahlungstransportprogramme.

Trotz guter optischer Übereinstimmung der spektralen Fluenzen besteht eine Abweichung von etwa 0,4 % zwischen dem Ergebnis von AMOS gegenüber denen von MCNP und PHITS. Dies entspricht einer Differenz von etwa 10 Standardabweichungen. Für die AMOS-Rechnung mit linearer Energiegruppierung ergibt sich eine Abweichung von etwa 0,2 %. Auch die TART-Rechnung weist bei Multi-Band-Darstellung der Querschnitte eine Abweichung von etwa 0,2 % zu den Ergebnissen von MCNP und PHITS sowie AMOS auf. Eine Simulation mit kontinuierlichen Wirkungsquerschnittsdaten ergibt eine Abweichung von 0,4 % zu MCNP und TART.

Da die zugrundeliegenden Graphit-Wechselwirkungsdaten der Bibliotheken ENDF/B-VI.8 (TART, MCNP) und ENDF/B-VII.0 (AMOS, PHITS) identisch sind, muss der Unterschied in den Ergebnissen durch die Datenaufbereitung verursacht worden sein. Andererseits sind die evaluierten Daten nur auf einige Prozent genau bekannt, während die Abweichung der Datenaufbereitung von AMOS weniger als ein Prozent beträgt. Die

Variationen zwischen den Rechenprogrammen liegen damit unterhalb der durch die Querschnittsdaten verursachten Unsicherheit.

Bei der mittleren Laufzeit je gestarteten Quellneutrons ergeben sich ebenfalls Unterschiede. Der Transport in AMOS ist mit Abstand am schnellsten. Bereits TART hat als zweitschnellstes Programm eine beinahe doppelt so lange Laufzeit. MCNP und PHITS weisen eine ungefähr zehnmal so lange Laufzeit auf. Andererseits führen die eingesetzten Algorithmen zur Schätzung der spektralen Teilchenflussdichte zu unterschiedlichen Standardabweichungen des Schätzwertes bei analoger Simulation und gleicher Anzahl von Quellstichproben.

AMOS verwendet im Gegensatz zu allen anderen Verfahren einen Stoßpunktschätzer mit virtuellen Stoßpunkten. Selbst für Neutronen mit gleicher Trajektorie ist die geschätzte Fluenz nur im statistischen Mittel gleich. Dies erhöht die Standardabweichung des Schätzers. Alle anderen Transportprogramme verwenden einen Spurlängenschätzer, welcher die zurückgelegte Strecke des Neutrons je Volumen misst und somit für eine vorgegebene Trajektorie exakt ist. Daher besitzt der Schätzwert bei gleicher Anzahl von Beiträgen eine geringere Standardabweichung. Dementsprechend ist die Leistungszahl von AMOS trotz halber Laufzeit etwa 25 % niedriger als die von TART. Die Leistungszahlen von PHITS und MCNP skalieren ähnlich, liegen aber aufgrund der deutlich längeren Laufzeit signifikant unter der von AMOS.

Für dünnere Transmissionsschichten ergibt sich zunächst ein ähnliches Bild. Bei Schichtdicken unterhalb von 4 cm wächst die Leistungszahl von MCNP und TART allerdings deutlich gegenüber der von AMOS an. Für eine Schichtdicke von 1 cm ist die Leistungszahl von TART mit $5,9 \cdot 10^6 \text{ s}^{-1}$ etwa viermal so groß wie die von AMOS mit $1,26 \cdot 10^6 \text{ s}^{-1}$. Die Leistungszahl von MCNP beträgt $7,5 \cdot 10^5 \text{ s}^{-1}$. Ursache für die niedrigere Effizienz von AMOS ist der steigende Anteil nicht gestreuter Neutronen, insbesondere bei Energien mit hoher mittlerer freier Weglänge. Während der Spurlängenschätzer von MCNP, PHITS und TART für diese Neutronen das exakte Ergebnis von 10 cm Detektordicke ergibt, besitzt der Wert des Stoßpunktschätzers von AMOS je Neutron eine Unsicherheit von etwa einer mittleren freien Weglänge.

4.2 Emission aus Graphitkugeln

Zur Überprüfung der Streuungssimulation wird die spektrale Teilchenfluenz nach dem Durchdringen einer dicken Materialschicht untersucht. Dabei wird eine isotrope, punktförmige Quelle monoenergetischer Neutronen in der Mitte einer homogenen Materialkugel angeordnet und die spektrale Fluenz außerhalb der Kugel geschätzt (vgl. Abbildung 4.5).

Mit einem ähnlichen experimentellen Aufbau mit einem kegelförmigen Einschnitt für eine d-t-Neutronenquelle werden Flugzeitspektren zur experimentellen Verifikation von Strahlungstransportprogrammen bestimmt [68]. Ein entsprechendes Problem ist Teil der Neutronenbenchmarkprobleme von MCNP. Das genaue Experiment kann hier nicht nachgebildet werden, da in AMOS zurzeit kein Flugzeitdetektor implementiert ist. Stattdessen wird die Fluenz der austretenden Neutronen bestimmt.

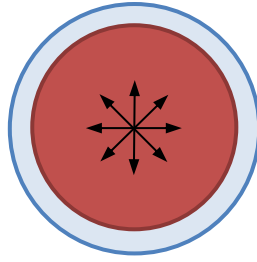


Abbildung 4.5: Skizze des betrachteten Transmissionsexperiments. Neutronen werden im Mittelpunkt einer Materialkugel (rot) emittiert und die austretende Fluenz in einer Kugelschale (blau) geschätzt.

Die Quellenergie der Neutronen beträgt 14 MeV. Es werden Graphitkugeln mit Durchmessern von 10 cm bis 50 cm untersucht. Die Fluenz wird dabei jeweils in einer Kugelschale ermittelt, deren Dicke ein Zehntel des Kugelradius beträgt. Für AMOS ergeben sich die in Abbildung 4.6 dargestellten spektralen Teilchenfluenzen. Die Simulationen für 10 cm bis 30 cm sind für 10^9 Quellstichproben durchgeführt worden. Für die Kugelradien 40 cm und 50 cm sind aufgrund der längeren Rechenzeit nur 10^8 Quellstichproben simuliert worden.

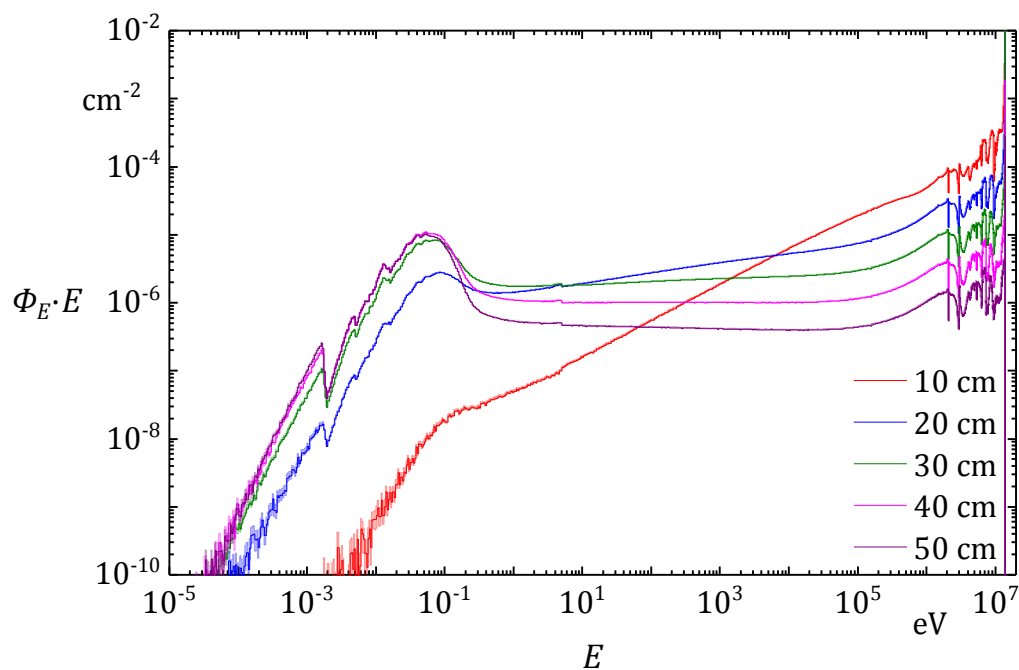


Abbildung 4.6: Emittierte spektrale Teilchenfluenz aus Graphitkugeln verschiedener Dicke in Lethargiedarstellung für eine mittige Punktquelle von Neutronen der Energie 14 MeV.

Mit zunehmender Materialdicke findet eine Moderierung der Neutronen statt. Ab etwa 30 cm Schichtdicke befindet sich ein Großteil der Neutronen im thermischen Gleichgewicht mit den Kohlenstoffatomen in der Graphitkugel. Die Sprünge in der spektralen Fluenz bei niedrigen Energien entstehen durch Unstetigkeiten im Wirkungsquerschnitt für chemisch in Graphit gebundenen Kohlenstoff. Durch die Gitterstruktur von Graphit

entstehen Sprünge im kohärenten Streuquerschnitt, welche dem Schwellwert der Reflexion an verschiedenen Netzgitterebenen entsprechen. Die Unstetigkeit bei 5 eV entsteht durch den Übergang vom Modell chemisch gebundenem zu freiem Kohlenstoff.

Zur Untersuchung der Kinematik für elastische und inelastische Streuung ist dasselbe Spektrum in Abbildung 4.7 über einer linearen Energieachse dargestellt. Die schattierten Bereiche entsprechen den Energiebereichen, welche für elastische sowie inelastische Streuung an Kohlenstoff nach (2.99) für 14 MeV Neutronen erreichbar sind. Die Zahlenwerte entsprechen der Anregungsenergie in MeV.

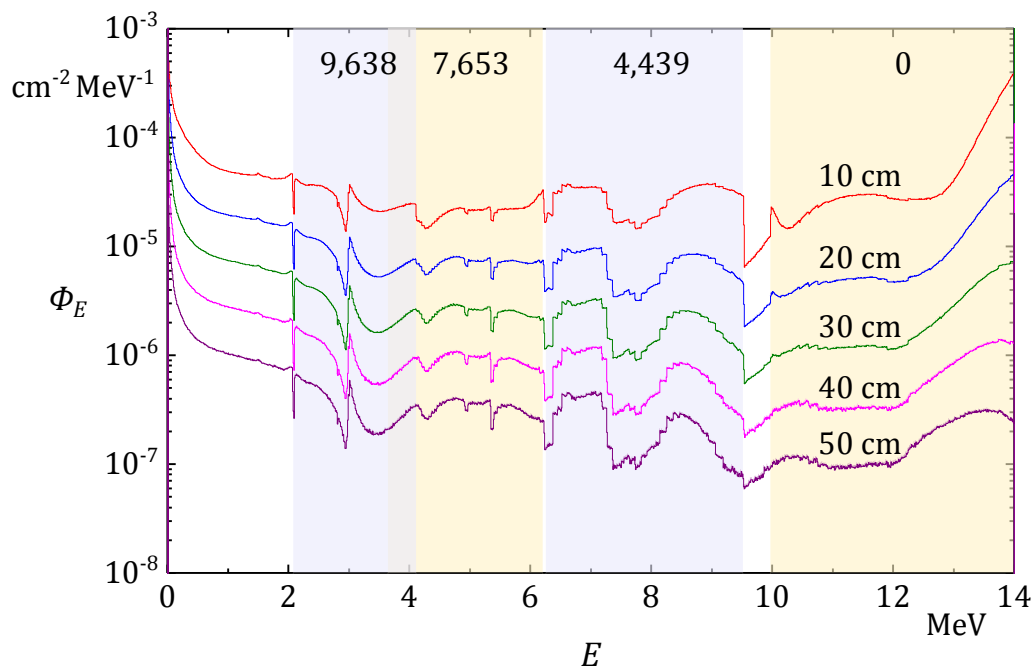


Abbildung 4.7: Emittierte spektrale Teilchenfluenz aus Graphitkugeln verschiedener Dicke. Die eingefärbten Bereiche entsprechen den von 14 MeV durch einmalige (in-)elastische Streuung erreichbaren Energieintervallen. Die Zahlenwerte entsprechen der Anregungsenergie des Kerns in MeV.

Insbesondere für die Kugel mit 10 cm Radius sind die möglichen Energiebereiche der einmal gestreuten Neutronen in der spektralen Fluenz deutlich zu erkennen. Gerade das Intervall zwischen der Oberkante der ersten inelastischen Streuung bei etwa 9,5 MeV und der Unterkante der elastischen Streuung bei etwa 10 MeV weist eine deutlich geringere spektrale Fluenz auf. Der entsprechende Energiebereich ist nur durch mehrfache elastische Streuung zu erreichen. Mit zunehmender Kugeldicke werden die Diskontinuitäten durch die steigende Wahrscheinlichkeit von Mehrfachstreuungen verwischt. Wie im vorigen Abschnitt sind auch hier im Energiebereich von 6 MeV bis 10 MeV aufgrund der verwendeten Gruppenstruktur Stufen in der spektralen Neutronenfluenz zu erkennen.

Zum Vergleich sind zunächst die Ergebnisse aller Strahlungstransportprogramme für die Kugel mit 10 cm Radius in Abbildung 4.8 dargestellt. Mit TART sind wie bei AMOS 10^9 Quellstichproben simuliert worden. In PHITS und MCNP sind jeweils 10^8 Quellstich-

proben berechnet worden. Wie im vorangegangenen Abschnitt stimmen die Ergebnisse im Großen und Ganzen überein. Die Abweichungen liegen, mit Ausnahme der unten diskutierten Kante bei 10 MeV, unter drei Prozent. Die spektrale Fluenz nach TART weicht jedoch im Bereich unter 1,5 MeV deutlich ab. Derselbe Effekt tritt mit abnehmender Deutlichkeit auch bei höheren Kugelradien auf. Die Ursache konnte nicht ermittelt werden.

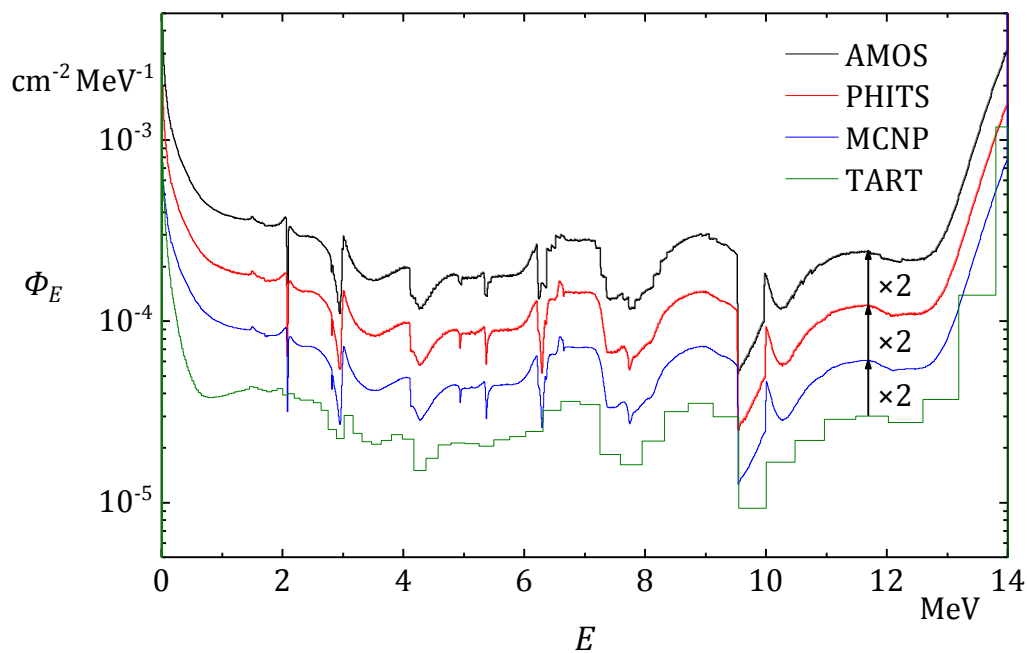


Abbildung 4.8: Spektrale Teilchenfluenz nach Transmission einer Graphitkugel mit 10 cm Radius für verschiedene Transportprogramme. Zur besseren Vergleichbarkeit sind die Kurven jeweils gegeneinander verschoben worden.

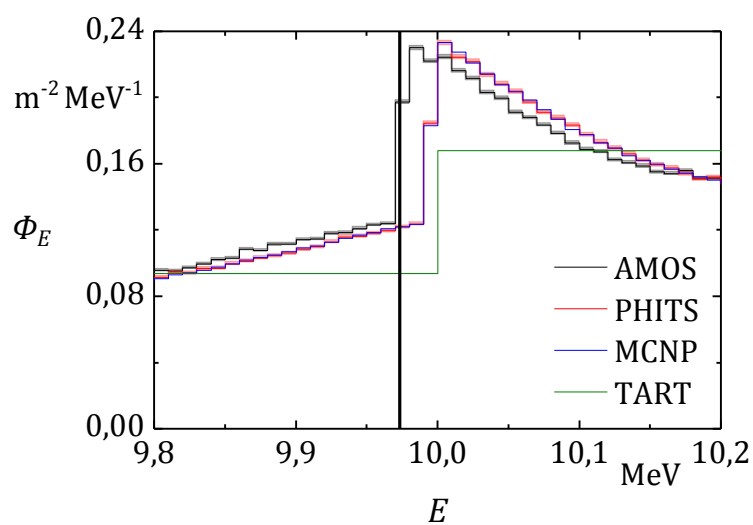


Abbildung 4.9: Ausschnitt aus der spektralen Teilchenfluenz um 10 MeV. Die senkrechte schwarze Linie entspricht der relativistischen Grenzenergie der elastischen Streuung von Neutronen mit 14 MeV Anfangsenergie.

In Abbildung 4.9 ist die Kante der elastischen Rückstreuung vergrößert dargestellt. Dadurch wird der Unterschied in den verwendeten Kinematikformeln sichtbar. Im Neutronentransportmodul von AMOS werden oberhalb des Schwellwerts thermischer Streuung von 10 eV die vollständigen relativistischen Formeln für elastische und inelastische Streuung verwendet. Alle anderen Programme nutzen bis 20 MeV die Näherung der klassischen Kinematik. Dies führt hier zu einer Verschiebung der Energiekante um etwa 100 keV.

In Abbildung 4.10 ist weiterhin die spektrale Teilchenfluenz der verschiedenen Transportprogramme für 50 cm Radius in Lethargieform dargestellt. Mit TART sind 10^9 , mit allen anderen Programmen 10^8 Quellneutronen simuliert worden. Bei 5 eV liegt für PHITS und MCNP aufgrund der Berücksichtigung von Bindungseffekten wie in AMOS ein Sprung in der spektralen Fluenz vor. Bei TART liegt dieser bei etwa 2 eV.

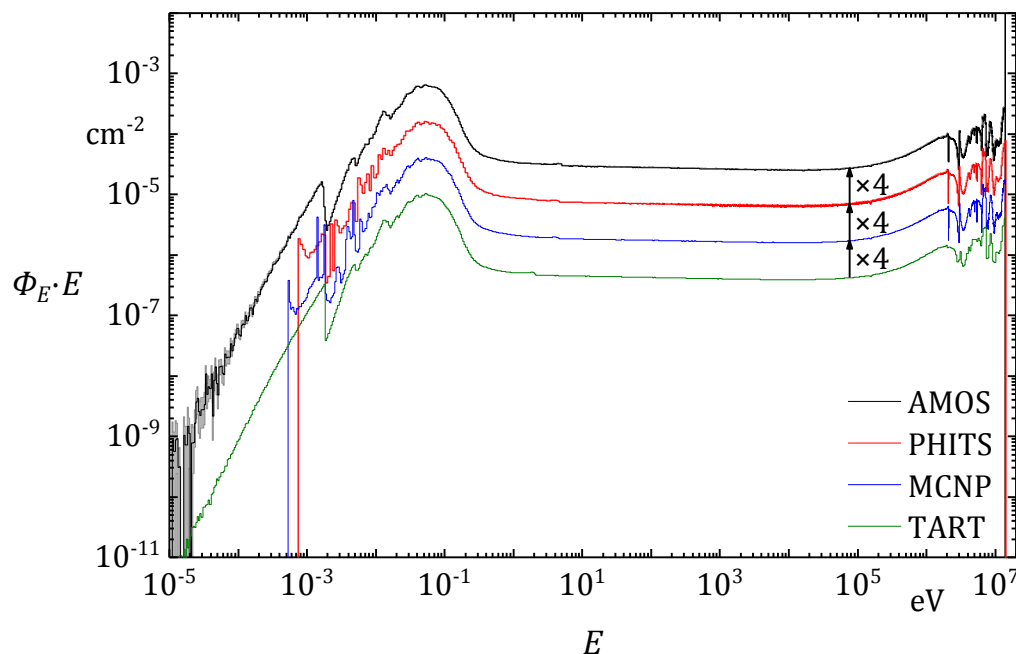


Abbildung 4.10: Spektrale Teilchenfluenz in Lethargiedarstellung nach Transmission durch eine Graphitkugel mit 50 cm Radius für verschiedene Transportprogramme. Zur besseren Vergleichbarkeit sind die Kurven jeweils gegeneinander verschoben worden.

Davon abgesehen stimmen die Ergebnisse im hochenergetischen und intermediären Bereich bezogen auf die doppelte Standardabweichung überein. Einzige Ausnahme bildet der Energiebereich um die Resonanz bei etwa 6 MeV, wo eine Abweichung von etwa zwei Prozent auftritt.

Im Bereich thermischer Streuung treten jedoch deutliche Abweichungen auf. Insbesondere wird nur bei AMOS und TART der Einfluss der Bragg-Kanten des kohärenten Streuquerschnitts am Graphit (vgl. Abschnitt 3.1.4) korrekt in der spektralen Fluenz abgebildet. Die Ergebnisse von MCNP und PHITS zeigen einen unregelmäßigen Verlauf, welcher den Anteil der Neutronen unter 1 meV deutlich unterschätzt. Ursache dafür ist

das verwendete ACE-Datenformat, in welchem die Wechselwirkungsdaten für gebundene Atomkerne abgespeichert werden. Statt einer kontinuierlichen Energie-Richtungsichte werden für die unelastische Streuung äquiprobabile diskrete Energie- und Winkelstützstellen gespeichert [4]. Daher sind Neutronen mit den jeweiligen diskreten Energien besonders häufig vertreten, wodurch das Spektrum deutliche Artefakte aufweist. Dieser Effekt wurde bereits in früheren Arbeiten beobachtet [69]. Die Verwendung diskreter Streuwinkel führt außerdem zu einer unphysikalischen Bevorzugung bestimmter Raumwinkel. Dies entspricht dem bei diskrete-Ordinate-Methoden auftretenden Ray-Effekt [20]. In MCNP-X wird seit Version 2.5.0 ein modifizierter Algorithmus eingesetzt, welcher laut den Autoren des Programms die entstehenden Artefakte in der Energieverteilung glättet [70]. Leider konnten keine Vergleichsrechnungen durchgeführt werden.

Die Laufzeiten und Leistungszahlen der Fluenzschätzungen sind in Abbildung 4.11 für verschiedene Schichtdicken dargestellt. Wie bei der Schichttransmission ist die mittlere Rechenzeit der Simulation einer analogen Quellstichprobe bei AMOS am geringsten. Mit etwas weniger als doppelter Laufzeit folgt TART, dann MCNP und schließlich PHITS mit etwa zehnfacher Laufzeit.

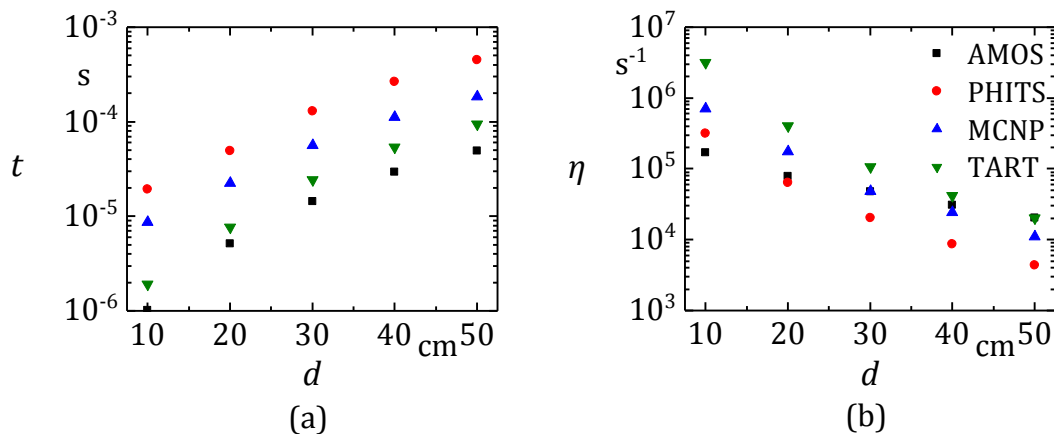


Abbildung 4.11: Laufzeit (a) und Leistungszahl (b) für analoge Simulation der Kugeltransmission in Abhängigkeit der Schichtdicke für verschiedene Transportprogramme.

Durch die dünne Detektorschicht von nur 1 cm bei 10 cm Kugelradius ist die Unsicherheit der Fluenz durch den Stoßpunktschätzer in AMOS deutlich höher als bei den Spurlängenschätzern der anderen Programme. Daher hat der Fluenzschätzer in AMOS trotz schnellster Laufzeit die geringste Leistungszahl. Mit zunehmendem Kugelradius wird auch die Detektorschicht dicker, wodurch AMOS im Vergleich immer besser abschneidet. Bei 50 cm Kugelradius und 5 cm Detektordicke ist die Leistungszahl gleich der von TART und deutlich besser als die von PHITS oder MCNP.

Eine in diesem Zusammenhang neu umgesetzte Maßnahme zur Verbesserung der Leistungszahl des in AMOS verwendeten Stoßpunktschätzers bei kleinem Detektor besteht darin, die mittlere freie Weglänge zu verringern und gleichzeitig die Wahrscheinlichkeit für einen realen Stoßpunkt zu senken. Dies führt zu mehr virtuellen

Stoßpunkten und damit mehr Beiträgen im Detektor. Im Gegenzug verlängert sich dadurch jedoch die Laufzeit.

Im Programm ist zur Demonstration dieses Prinzips eine maximale mittlere freie Weglänge λ_m als Parameter eingeführt worden. Dabei wird für alle Energiegruppen die minimale mittlere freie Weglänge überprüft und gegebenenfalls durch den gewählten Maximalwert ersetzt. Die Simulation der Kugel mit 10 cm Radius ist für verschiedene Werte des Parameters λ_m durchgeführt worden. Die Leistungszahlen und Laufzeiten relativ zum analogen Fall sind in Abbildung 4.12 dargestellt.

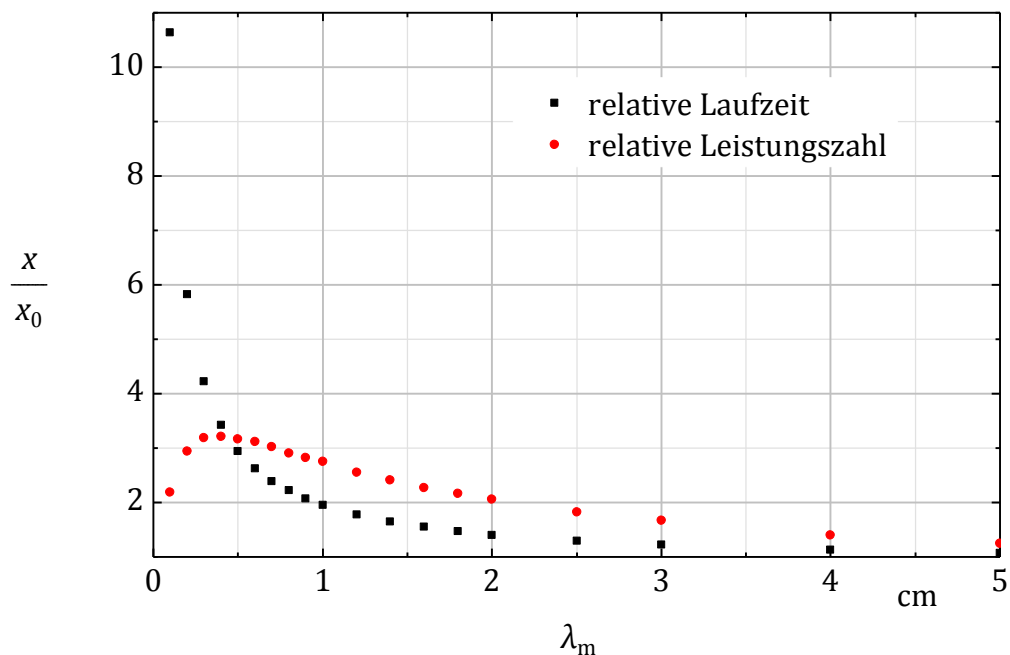


Abbildung 4.12: Laufzeit und Leistungszahl der Fluenzschätzung in einer Kugelschale mit 1 cm Dicke um eine Graphitkugel mit 10 cm Radius für variable maximale mittlere freie Weglänge λ_m bezogen auf die Ergebnisse der analogen Simulation.

Bereits für im Bezug zur Detektordicke von 1 cm geringe Einschränkungen auf 4 cm bzw. 5 cm ergibt sich eine merkliche Steigerung der Leistungszahl ohne nennenswerte Änderung der Laufzeit. Wird der Wert auf die Detektordicke festgelegt, so ergibt sich trotz doppelter Laufzeit eine fast verdreifachte Leistungszahl. Das Maximum wird bei 0,4 cm und einer Verbesserung um den Faktor 3,2 bei etwa 3,5-facher Laufzeit erreicht. Die erreichte absolute Leistungszahl liegt mit $5,4 \cdot 10^5 \text{ s}^{-1}$ deutlich über der von PHITS, jedoch weiterhin unter MCNP und TART. Eine weitere Verkürzung lässt die Laufzeit durch die erhöhte Anzahl virtueller Stöße stark ansteigen und führt wieder zu einer geringeren Leistungszahl.

Grundsätzlich ist eine geeignete Wahl und Parametrisierung varianzreduzierender Maßnahmen stark problemabhängig und übersteigt den Rahmen dieser Arbeit. Das Beispiel soll jedoch verdeutlichen, dass die Unsicherheit des Ergebnisses durch geeignete

te Techniken deutlich verbessert werden kann und die Leistungszahl auch bei kleinem Detektorvolumen die Größenordnung der anderen Transportprogramme erreicht.

4.3 Fluenz und Reaktionsanzahl für ein Helium-3-Zählrohr

Die folgenden Rechnungen basieren auf einer Aufgabenstellung, welche im Rahmen des europäischen QUADOS-Programms zur Vergleichbarkeit der Benutzung von Rechenprogrammen in der Strahlungsdosimetrie untersucht wurde [71]. Es soll der Messwert eines vereinfachten Ortsdosisleistungsmessgeräts bestimmt und der Einfluss von Position und Umgebung des Detektors untersucht werden. Dieser besteht aus einem kugelsymmetrischen ^3He -Zählrohr mit einem Volumen von etwa 17 cm^3 und einem Fülldruck von 200 kPa in einer Moderatorkugel aus Polyethylen mit einem Durchmesser von 25 cm. Der Detektor befindet sich zusammen mit einer Am-Be-Kalibrierquelle in einem zylindrischen PE-Behälter. Ein Aufriss ist in Abbildung 4.13 dargestellt.

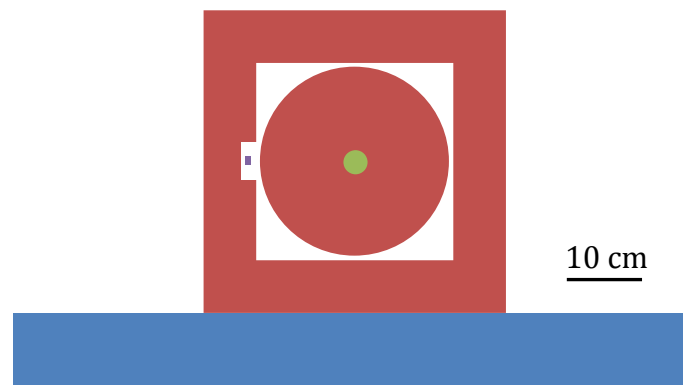


Abbildung 4.13: Schnittbild durch den Versuchsaufbau. Die zylindrische PE-Abschirmung (rot) steht auf einem Betonsockel (blau). Im Inneren befindet sich die Quelle (violett) sowie das ^3He -Zählrohr (grün) mit PE-Moderatorkugel (rot).

Im Rahmen dieser Arbeit ist die spektrale Neutronenfluenz im Helium sowie die spektrale und integrale Reaktionsanzahl je Quellneutron der Nachweisreaktion $^3\text{He}(n, p)$ im Zählgas untersucht worden. Für die Am-Be-Quelle wird das in ISO 8529-1 [72] festgelegte Neutronenspektrum zugrunde gelegt. Zunächst wird mit AMOS der Einfluss der chemischen Bindung von Wasserstoff in Polyethylen untersucht. Dazu wird die Simulation einmal mit dem freien Wasserstoffquerschnitt und einmal mit dem Querschnitt für in PE gebundenen Wasserstoff durchgeführt. Die Ergebnisse für 10^8 Quellstichproben sind in Abbildung 4.14 dargestellt. Da die gebundenen Wechselwirkungsdaten nur bis 5 eV angegeben sind, ist nur ein Teil des Spektrums abgebildet.

Die Verwendung der freien Wirkungsquerschnitte führt zu einer deutlichen Überschätzung der thermischen Fluenz. Dies spiegelt sich besonders deutlich in den integralen Werten $\Phi_f = (8,014 \pm 0,015)\text{ m}^{-2}$ für freies Gas und $\Phi_b = (7,151 \pm 0,015)\text{ m}^{-2}$ für gebundenen Wasserstoff wider.

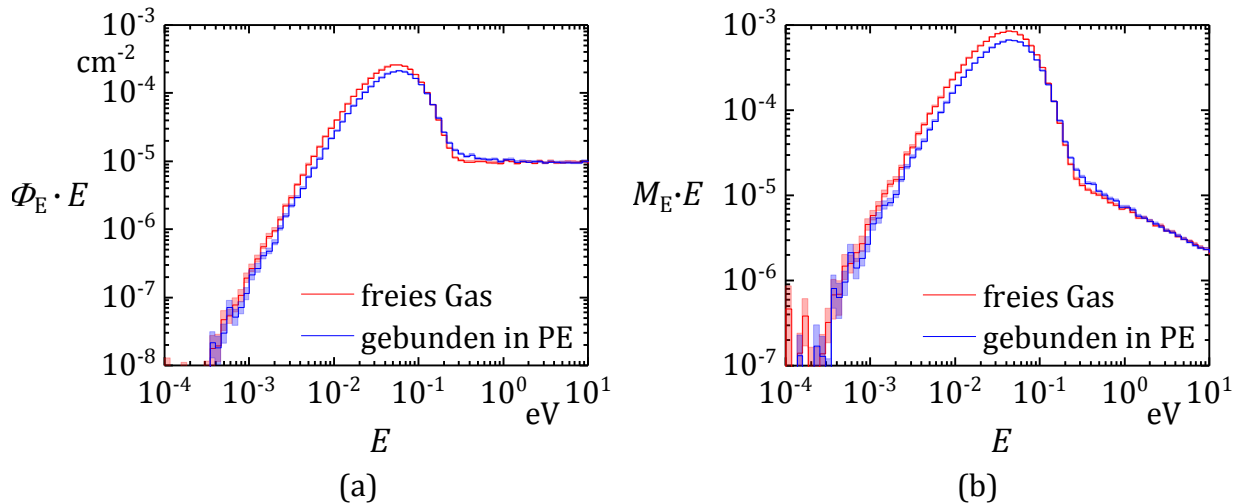


Abbildung 4.14: Spektrale Neutronenfluenz (a) und spektrale Reaktionsanzahl (b) im Heliumzählrohr in Lethargiedarstellung mit und ohne Verwendung gebundener Wirkungsquerschnitte für Polyethylen.

Die spektrale Reaktionsanzahl entspricht nach (2.19) dem Produkt aus spektraler Fluenz und Wirkungsquerschnitt. Da der (n, p) -Querschnitt wie $1/\sqrt{E}$ verläuft und somit niedrige Energien hervorhebt, wird die Reaktionsanzahl bei Nichtberücksichtigung der Bindung sogar noch stärker überschätzt. Die integralen Ergebnisse betragen $M_f = (1,734 \pm 0,004) \cdot 10^{-3}$ und $M_b = (1,363 \pm 0,004) \cdot 10^{-3}$. Dies entspricht einer Abweichung von mehr als 25%. Dies zeigt, wie empfindlich das Ergebnis der Berechnung von der verwendeten Beschreibung der thermischen Streuung abhängt.

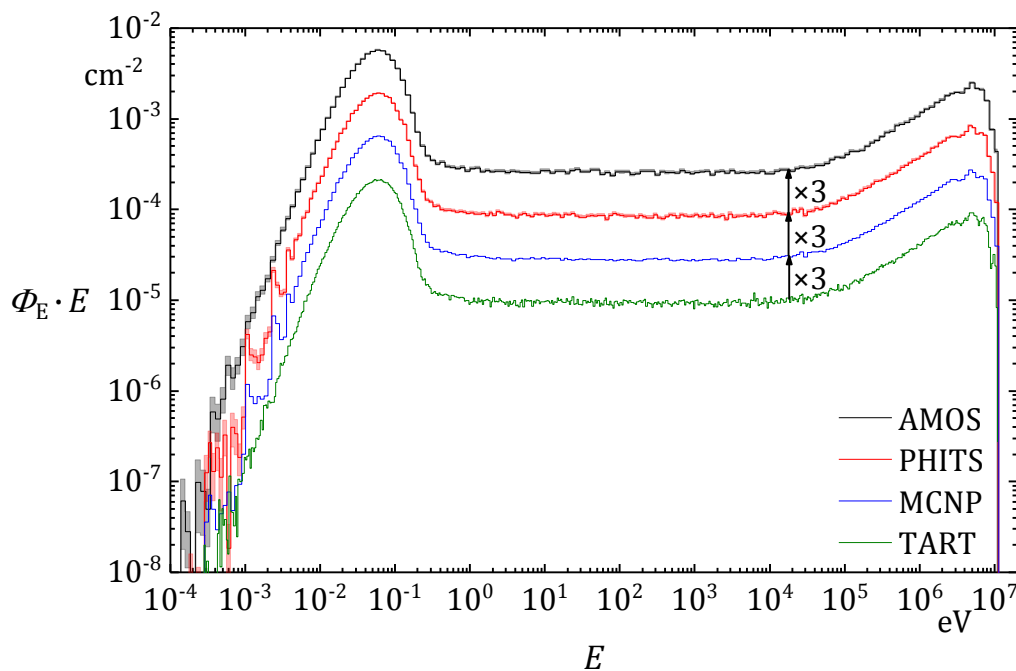


Abbildung 4.15: Spektrale Neutronenfluenz im Heliumzählrohr in Lethargiedarstellung für verschiedene Strahlungstransportprogramme. Zur besseren Vergleichbarkeit sind die Kurven jeweils gegeneinander verschoben worden.

Die Rechenzeiten je Quellstichprobe für freie und gebundene Wirkungsquerschnitte betragen $t_f = 2,67 \cdot 10^{-5}$ s bzw. $t_b = 3,43 \cdot 10^{-5}$ s. Die Simulation mit gebundenen Querschnitten benötigt also etwa 30% länger. Dies ist darauf zurückzuführen, dass die freie thermische Streuung isotrop ist, sodass Stichproben für Sekundärenergie und Winkel aus zwei eindimensionalen Dichtefunktionen erhoben werden können. Die gebundenen Daten liegen hingegen als zweidimensionale Dichtefunktionen vor, deren Auswertung etwas länger dauert.

Im Folgenden werden die Ergebnisse für die verschiedenen Transportprogramme und jeweils 10^8 Quellneutronen diskutiert. In Abbildung 4.15 ist zunächst die spektrale Fluenz dargestellt. Generell liegt wieder eine sehr gute Übereinstimmung vor. Allerdings treten bei wenigen Millielektronenvolt deutliche Strukturen in den Kurven von PHITS und MCNP auf. Diese sind wie bei der Kugeltransmission den diskretisierten Energie-Richtungsdichten für den in PE chemisch gebundenen Wasserstoff geschuldet.

Bei den in Abbildung 4.16 dargestellten spektralen Reaktionsanzahlen je Quellneutron ergibt sich ein ähnliches Bild. Deutlichster Unterschied ist die spektrale Reaktionsanzahl von PHITS, welche im Gegensatz zu den anderen Strahlungstransportprogrammen über einen Reaktionszähler geschätzt wird. MCNP und TART verwenden einen Spurlängenschätzer und AMOS den bereits erwähnten Stoßpunktschätzer. Diese können auch dann Beiträge schätzen, wenn im Material keine Wechselwirkung stattfindet und weisen dementsprechend eine geringere Unsicherheit auf. Die Artefakte der Fluenz für niedrige Energien bei PHITS und MCNP treten auch in der Reaktionsanzahl auf. Davon abgesehen ist eine gute Übereinstimmung der Ergebnisse vorhanden.

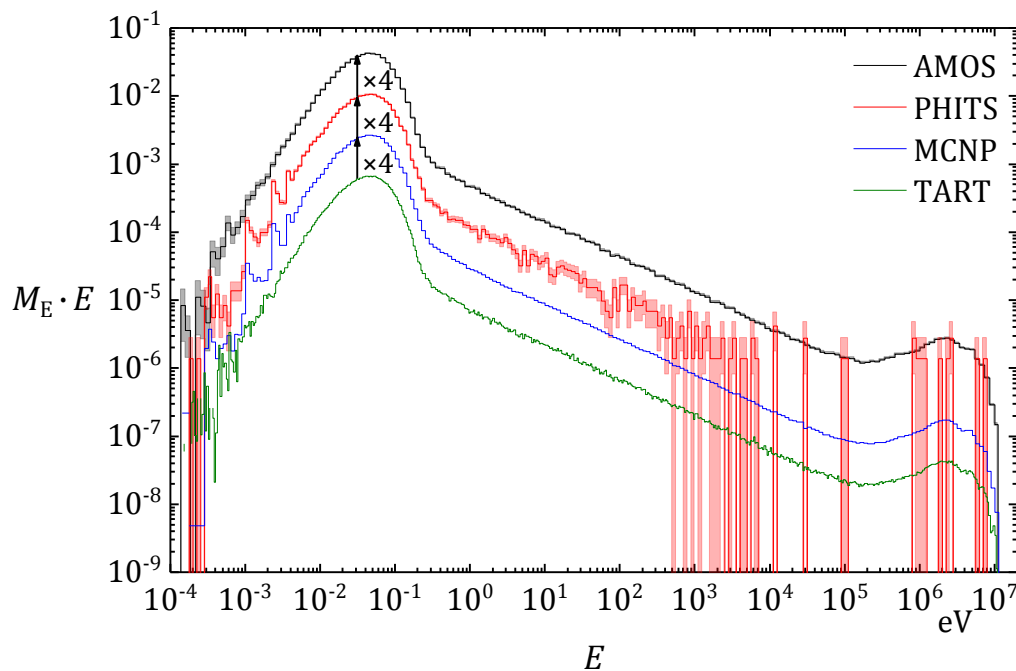


Abbildung 4.16: Spektrale Reaktionsanzahl im Heliumzählrohr je Quellneutron in Lethargiedarstellung für verschiedene Transportprogramme. Zur besseren Vergleichbarkeit sind die Kurven jeweils gegeneinander verschoben worden.

Die integralen Ergebnisse sind in Tabelle 4.2 auf die letzte signifikante Stelle bezüglich 2σ zusammengefasst. Die Verhältnisse der Laufzeiten sind ähnlich den vorigen Rechnungen. AMOS ist wieder beinahe doppelt so schnell wie TART und etwa zehnmal so schnell wie MCNP und PHITS.

	AMOS	PHITS	MCNP	TART
Laufzeit je Neutron in 10^{-6} s	43,3	338	165	70,2
Fluenz in m^{-2}	7,15	7,18	7,16	7,13
Leistungszahl in s^{-1}	57,7	15,1	18,6	42,1
Reaktionsanzahl in 10^{-3}	1,36	1,37	1,37	1,36
Leistungszahl in s^{-1}	30,8	4,06	8,11	18,5

Tabelle 4.2: Fluenz und Reaktionsanzahl sowie Rechenzeit der Simulation für verschiedene Strahlungstransportprogramme. Ebenfalls dargestellt sind die zugehörigen Leistungszahlen.

Da die Neutronen im Helium meist nach dem ersten Stoß absorbiert werden, ist ein Stoßpunktschätzer nicht wesentlich schlechter als ein Spurlängenschätzer. Die Leistungszahl des Fluenzschätzers von AMOS ist daher immer noch 30% größer als die des Schätzers von TART. MCNP und PHITS haben entsprechend niedrigere Leistungszahlen. Die Fluenzen unterscheiden sich um mehr als zehn Standardabweichungen. Die Abweichung ist dabei etwa konstant über den gesamten Energiebereich. Die Ursache ist nicht genau geklärt.

Die Reaktionsanzahlen weisen geringere Unterschiede auf. Andererseits ist der Vorsprung von AMOS in der Leistungszahl größer, da in der Reaktionsanzahl die thermischen Neutronen mit quasi vollständiger Absorption und kurzen mittleren freien Weglängen dominieren, für die eine Spurlängenschätzung kaum Vorteile hat. AMOS weist hier eine fast doppelt so hohe Leistungszahl wie TART auf. PHITS schneidet aufgrund des verwendeten Reaktionszählschätzers am schlechtesten ab.

4.4 Reaktionsanzahl für ein Albedodosimeter

Die untersuchte Fragestellung stammt wie im vorigen Abschnitt aus dem QUADOS-Programm [71]. Für verschiedene monoenergetische Neutronenfelder soll der Messeffekt eines Albedodosimeters berechnet werden. Das Dosimeter besteht aus vier Lithiumfluorid-Thermolumineszenzdetektoren in einer Aluminiumplatte, welche von einem Plastegehäuse umgeben ist. Jeweils zwei Detektorelemente sind mit ^6Li und zwei mit ^7Li angereichert. Es wird zugrunde gelegt, dass der Messeffekt allein durch die Absorption $^6\text{Li}(n,t)$ mit langsamen Neutronen zustande kommt. Die Elemente mit angereicherter ^6Li werden als neutronenempfindlich, die anderen als unempfindlich bezeichnet. Die Verwendung beider Typen ermöglicht über Differenzbildung die gleichzeitige Bestimmung von Photonen- und Neutronendosis.

Da die Detektoren nur für langsame Neutronen empfindlich sind, während der größte Teil der Dosis bei hohen Neutronenenergien erzeugt wird, wird zur Messung die Albedo

des menschlichen Körpers bezüglich Neutronen ausgenutzt. Der Körper wirkt durch den hohen Wasserstoffanteil als Moderator, sodass schnelle Neutronen abgebremst und als langsame Neutronen emittiert werden. Durch die Bestimmung des Verhältnisses der langsamen Neutronen, welche direkt auf das Dosimeter treffen und derjenigen, welche durch den Körper moderiert werden, kann auf den Anteil schneller Neutronen im Strahlungsfeld rückgeschlossen werden.

Dazu werden jeweils ein neutronenempfindlicher und ein neutronenunempfindlicher Detektor in Richtung Körper bzw. in Richtung Strahlungsfeld mit boriertem Polyethylen gegen langsame Neutronen abgeschirmt. Zur Illustration sind in Abbildung 4.17 Vorder- und Rückseite sowie ein Querschnitt durch das Dosimeter dargestellt. Die Nummern in den LiF-Elementen bezeichnen die vier verwendeten Detektoren. Elemente 1 und 3 sind neutronenempfindlich, während 2 und 4 unempfindlich sind. Elemente 1 und 2 sind dem Neutronenfeld direkt ausgesetzt, während der Messeffekt der Elemente 3 und 4 von den rückgestreuten, moderierten Neutronen dominiert wird.

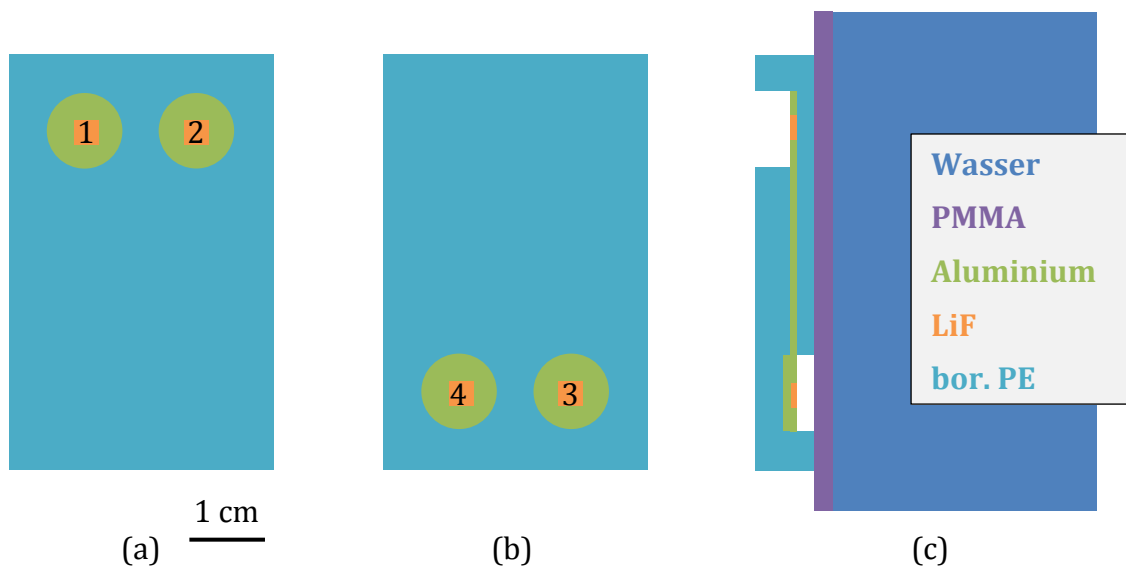


Abbildung 4.17: Darstellung des Albedodosimeters: (a) Vorderseite, (b) Rückseite, (c) Querschnitt mit Wasserquaderphantom und Farblegende.

Zielstellung ist es, die Wahrscheinlichkeit einer ${}^6\text{Li}(n, t)$ -Reaktion zu jedem Detektorelement für monoenergetische Neutronen von 25 meV bis 20 MeV zu bestimmen. Die Ergebnisse von AMOS, PHITS, TART und MCNP sind zusammen mit den einfachen Standardabweichungen in Abbildung 4.18 dargestellt.

Für AMOS, PHITS und TART wurden jeweils 10^7 Quellstichproben simuliert. Es ist deutlich zu erkennen, dass Reaktionsanzahl je Quellneutron der neutronenempfindlichen Elemente 1 und 3 um mehr als zwei Größenordnungen über ihren neutronenunempfindlichen Gegenstücken 2 und 4 liegen. Das direkte Element 1 ist empfindlicher für langsame Neutronen, während das Albedo-Element 3 einen höheren Messeffekt bei schnellen Neutronen aufweist. Die Ergebnisse der verschiedenen Transportprogramme stimmen im Rahmen der Unsicherheit sehr gut überein. Aufgrund des bereits im vorigen

Abschnitt besprochenen Reaktionszählschätzers weist PHITS insbesondere bei den neutronenunempfindlichen Elementen 2 und 4 eine sehr hohe Unsicherheit auf, da bei einem Messeffekt von etwa $M = 10^{-7}$ je Quellneutron und 10^7 Quellstichproben im Mittel nur eine Reaktion auftritt.

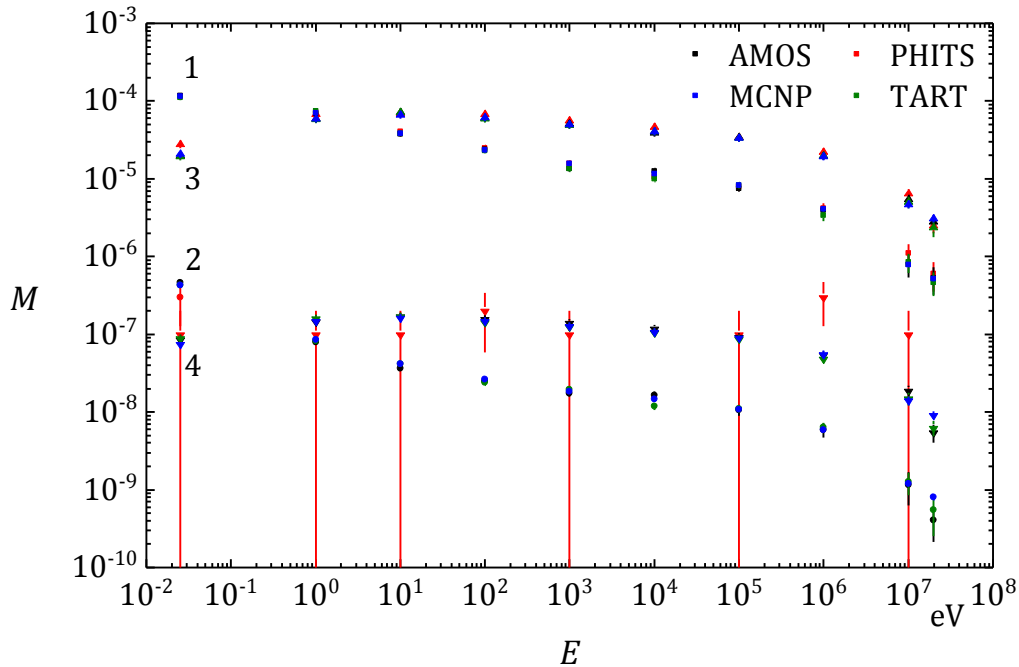


Abbildung 4.18: Reaktionsanzahl im Albedodosimeter je Quellneutron für jedes Detektorelement nach verschiedenen Strahlungstransportprogrammen.

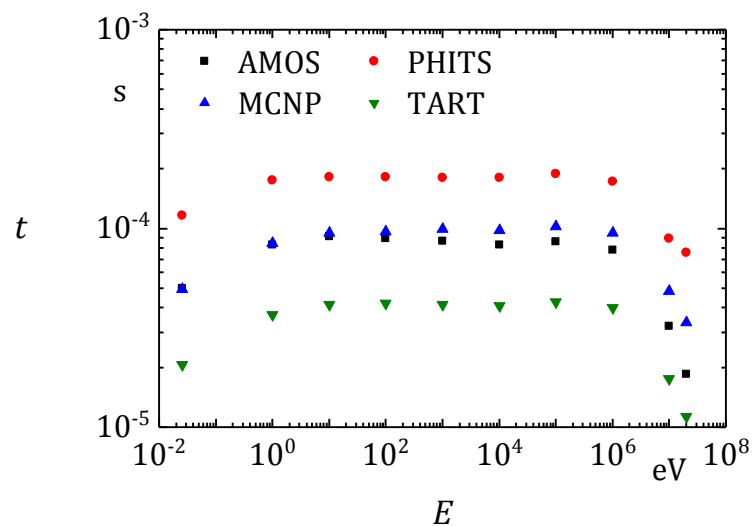


Abbildung 4.19: Rechenzeit je Quellstichprobe in Abhängigkeit der Quellenergie für verschiedene Strahlungstransportprogramme.

Die Rechenzeit der Simulationen in den unterschiedlichen Transportprogrammen ist in Abbildung 4.19 dargestellt. Über den Energiebereich von 1 eV bis 1 MeV ist sie nahezu konstant. Bei niedrigeren und höheren Energien sinkt sie jedoch deutlich. Bei langsamen

Neutronen wird dies durch eine verstärkte Absorption im borierten Polyethylen verursacht. Bei schnellen Neutronen wird die Transmission der Neutronen durch das Wasserquaderphantom relevant.

Die Simulation mit TART benötigt die wenigste Rechenzeit, während PHITS die längste Zeit beansprucht. Zwischen beiden liegt ein etwa konstanter Faktor von fünf. MCNP und AMOS liegen beide für niedrige Energien mit etwas mehr als doppelter Rechenzeit zu TART etwa in der Mitte. Für hohe Energien wird der Abstand zwischen AMOS und TART geringer, und beträgt bei 20 MeV nur einen Faktor 1,6. Das Verhältnis zwischen MCNP und TART bleibt jedoch etwa konstant, sodass eine Verbesserung von AMOS für hohe Energien festzustellen ist. Zur Untersuchung dieser Tatsache ist in Abbildung 4.20 das Verhältnis der Rechenzeit von AMOS zu TART zusammen mit dem Anteil thermischer Streuung an allen realen Wechselwirkungen in AMOS dargestellt worden.

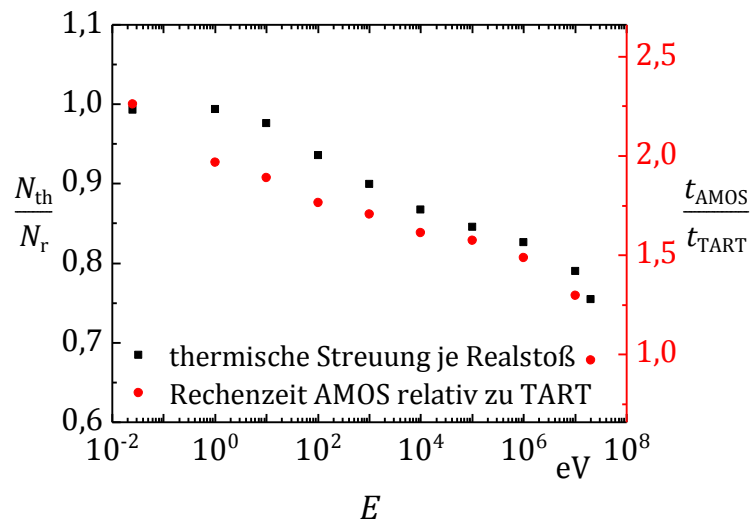


Abbildung 4.20: Anteil thermischer Streuung und Verhältnis der Rechenzeiten von AMOS und TART für verschiedene Quellenergien.

Mit zunehmender Energie ist ein gemeinsamer, abfallender Trend für beide Größen zu erkennen. Es ist davon auszugehen, dass die Verringerung der Rechenzeit von AMOS im Vergleich zu TART mit der geringeren Anzahl von thermischen Streuungen im Zusammenhang steht. Wie in Abschnitt 4.3 im Vergleich der Simulation mit gebundenem und freiem Wirkungsquerschnitt dargelegt, benötigt die Berechnung thermischer Streuung aufgrund der doppeltdifferentiellen Wirkungsquerschnitte länger.

Andererseits bedeutet ein hoher Anteil thermischer Streuung, dass ein Großteil der Stichproben eine Energie unterhalb von 5 eV besitzt. In diesem Energiebereich ist die mittlere freie Weglänge in ^6Li besonders klein. Obwohl die LiF-Elemente nur einen kleinen Teil des Gesamtvolumens einnehmen, dominieren sie damit die minimale mittlere freie Weglänge Λ_m in der gesamten Simulation (vgl. Abschnitt 3.3.2). Ein hoher Anteil thermischer Streuung bedeutet daher auch eine erhöhte Anzahl virtueller Stoßpunkte in der Simulation. Zur Veranschaulichung ist in Abbildung 4.21 die Anzahl virtueller Stoßpunkte N_v im Verhältnis zur Gesamtzahl der Stoßpunkte N_t dargestellt.

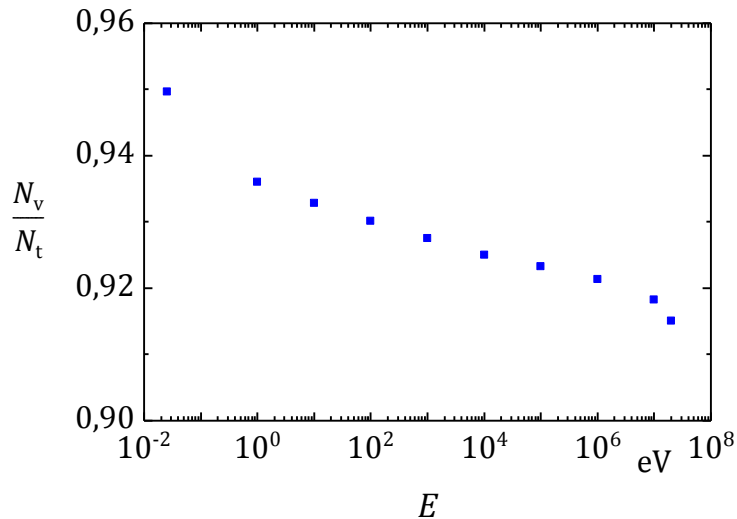


Abbildung 4.21: Verhältnis virtueller Stöße zur Gesamtstoßzahl für verschiedene Quellenergien.

Der abnehmende Trend mit zunehmender Energie wird auch hier reproduziert. Allerdings ist die Änderung des Anteils virtueller Stöße von etwa 95% auf 91,5% geringer als bei der Rechenzeit. Dennoch wird davon ausgegangen, dass der hohe Anteil an virtuellen Stoßpunkten die Rechenzeit verlängert.

Zur Einschätzung der Effizienz der Simulationen sind für eine Quellenergie von 10 MeV exemplarisch die Leistungszahlen der Reaktionsraten der Elemente für die Strahlungstransportprogramme in Abbildung 4.22 dargestellt. Die Energie von 10 MeV ist danach gewählt worden, dass für diese die Leistungszahlen der Reaktionsschätzer aller Elemente minimal werden.

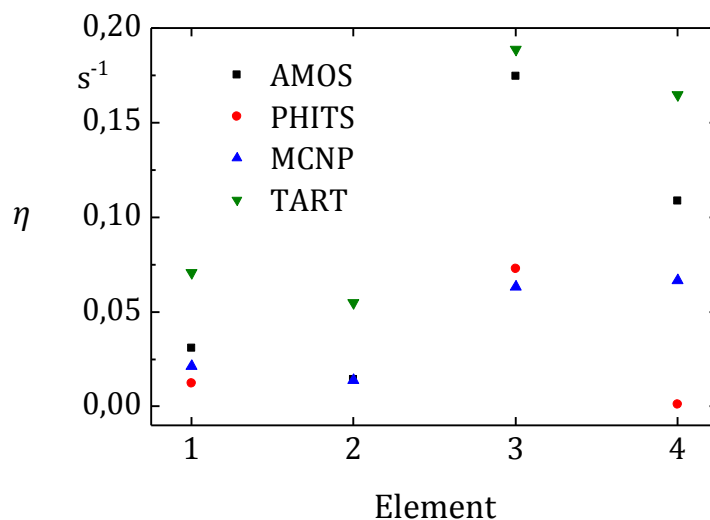


Abbildung 4.22: Leistungszahl der Detektorelemente nach verschiedenen Strahlungstransportprogrammen für eine Quellenergie von 10 MeV.

Wie anhand der geringeren Laufzeit zu erwarten ist die Leistungszahl von TART etwa um einen Faktor zwei besser als die von AMOS. Durch die geringere Rechenzeit besteht

aber ein teilweise deutlicher Vorteil gegenüber MCNP und TART. Die Leistungszahl der neutronenempfindlichen Elemente ist jeweils höher als die der unempfindlichen Elemente. Analog zum vorangegangenen Abschnitt ist hier durch den dominierenden Absorptionsquerschnitt der Unterschied zwischen Stoßpunkt- und Spurlängenschätzer geringer. Durch die hohe Primärenergie der Neutronen von 10 MeV finden deutlich mehr Reaktionen in den Albedo-Elementen auf, sodass deren Leistungszahl deutlich über denen der direkten Elemente liegt.

5 Diskussion und Schlussfolgerungen

Die Ergebnisse der durchgeführten Verifikationsrechnungen zeigen, dass der entwickelte Algorithmus den Neutronentransport physikalisch korrekt abbildet. Im Vergleich mit typischen Neutronentransportprogrammen ergibt sich für alle Beispiele eine gute Übereinstimmung. Die Abweichungen zwischen den integralen Ergebnissen von AMOS und den Vergleichsprogrammen sind von derselben Größenordnung wie die Abweichungen der Programme untereinander.

Die vorgeschlagene, an die evaluierten Daten angepasste Gruppenstruktur mit 2357 Gruppen ist für Fragestellungen mit vielen Streubeiträgen uneingeschränkt geeignet. Dies ist an den Vergleichsrechnungen mit großen Materialvolumina belegt worden. Bei einer Transmission durch dünne Schichten mit hoher Auflösung hat sich eine lineare Gruppenstruktur als vorteilhafter herausgestellt. Für die integrale Strahlungsfeldgröße Fluenz ist der Unterschied zwischen Verwendung der angepassten und der linearen Gruppenstruktur aber vernachlässigbar.

Im Vergleich zu dem auf Geschwindigkeit optimierten Programm TART erreicht das Neutronentransportmodul für AMOS in allen Rechenbeispielen bei ähnlicher Rechengeschwindigkeit eine höhere Auflösung. Die Leistungszahl der verwendeten Schätzer liegt dabei in derselben Größenordnung. Durch die freie Wahl der zugrundeliegenden Wechselwirkungsbibliotheken, der Energiegruppeneinteilung sowie der Energieeinteilung für die Schätzung spektraler Größen ist der Neutronentransport in AMOS deutlich flexibler.

Die gute Übereinstimmung der Ergebnisse von AMOS mit den auf Detailtreue entwickelten Transportprogrammen MCNP und PHITS zeigt, dass die verwendete Datenaufbereitung und der entwickelte Transportalgorithmus den gesetzten Anforderungen voll entspricht. Dabei ist die Leistungszahl von AMOS ein- bis fünfmal so groß wie die von MCNP und zwei- bis zehnmal so groß wie die von PHITS.

Insgesamt hat sich das Neutronentransportmodul in AMOS durch die hohe Rechengeschwindigkeit und große Flexibilität bezüglich der verwendeten Wechselwirkungsdaten für die Berechnung von Neutronenfeldern als leistungsfähige Alternative zu bestehenden Neutronentransportprogrammen erwiesen. Im Folgenden sollen noch einige Vorschläge für mögliche Erweiterungen gegeben werden, welche über den Rahmen dieser Arbeit hinausgehen.

Generell wird eine systematische Implementierung und Verifikation varianzreduzierender Maßnahmen zur Verbesserung der Effizienz der Neutronenberechnungen vorgeschlagen. Diese sind insbesondere für Fragestellungen mit dicken Abschirmungen oder kleinen Detektorvolumina sinnvoll. Durch eine Anpassung der zugrundeliegenden Stichprobendichte kann in diesen Fällen eine effizientere Abdeckung des Phasenraums und damit einhergehend eine geringere statistische Unsicherheit erreicht werden. Eine sehr flexible Methode ist die sogenannte Gewichtsfenstertechnik, welche orts- und energieabhängig eine Vermehrung oder Verminderung der Anzahl an erzeugten Stich-

proben je Stoßordnung ermöglicht [73]. Diese ist für den Photonentransport bereits in AMOS implementiert worden [74].

Darüber hinaus erscheint auch die Untersuchung weiterer Schätzfunktionen sinnvoll. Eine Modifikation der Geometrie für den Einsatz eines Spurlängenschätzers ist beispielsweise bereits in Planung. Dabei soll eine von der Geometrie unabhängige Einteilung des Volumens in sogenannte Weltquader erfolgen und eine Bestimmung der Schnittpunkte von Trajektorien mit deren Oberflächen ermöglicht werden. Neben der Verwendung von Spurlängenschätzern soll dadurch auch die Verwendung verschiedener minimaler mittlerer freier Weglängen in jedem Quader möglich sein [75]. Dies kann in bestimmten Fällen zu einer deutlichen Senkung der Anzahl von virtuellen Stoßpunkten und damit einer weiteren Verbesserung der Effizienz führen.

Eine wichtige Erweiterung insbesondere für Strahlenschutzberechnungen ist die Implementierung einer detaillierten Behandlung der bei Neutronenreaktionen entstehenden Sekundärphotonen. Da die in den ENDF-Daten gegebenen Ausbeuten und Energiedichten nur für ausgewählte Nuklide und meist nur mit geringer Genauigkeit zur Verfügung stehen, ist deren Simulation selbst in den bestehenden Transportprogrammen nur unbefriedigend umgesetzt. Hier wird die Erarbeitung eines neuen Konzepts vorgeschlagen, um anhand der Reaktionen den Anregungszustand des Kerns zu bestimmen. Die Abregung kann dann auf Basis evaluierter Kernanregungsdaten im ENSDF-Format simuliert werden, welche bereits für die Simulation von Nuklidquellen in AMOS [11] eingesetzt werden.

6 Zusammenfassung

In dieser Arbeit ist ein neuartiger Transportalgorithmus für Neutronen vorgestellt und seine Umsetzung im Strahlungstransportprogramm AMOS beschrieben worden. Für die Modellierung der Wechselwirkungsprozesse werden evaluierte Wirkungsquerschnittsdaten im ENDF-Format verwendet, welche mit einer eigens dafür entwickelten Anwendung für eine effiziente Simulation aufbereitet worden sind.

Das in C++ verfasste Programm umfasst ungefähr 18.000 Quellcodezeilen. Um sowohl eine hohe Genauigkeit als auch eine gute Effizienz zu erzielen, werden gruppengemittelte Wirkungsquerschnitte mit hoher Auflösung erzeugt. Für allgemeine Anwendungen ist eine Gruppenstruktur mit 2357 Energieintervallen empirisch gefunden und an mehreren Beispielen verifiziert worden. Grundlegender Bestandteil des Aufbereitungsprogramms ist eine Programmbibliothek zum Einlesen von ENDF-Daten sowie zur analytisch korrekten Interpolation und Integration der enthaltenen Darstellungen. Diese ermöglicht die Aufbereitung der Daten für den Transportalgorithmus.

Die differentiellen Wirkungsquerschnitte werden zunächst über eine vorgegebene Energiegruppenstruktur gemittelt und alle im Schwerpunktsystem vorliegenden Dichtefunktionen ins Laborsystem transformiert. Die Sekundärteilchendichten in Laborkoordinaten werden für den Transportalgorithmus mit linearen Polynomzügen approximiert. Die Stützpunkte werden dabei ausgehend von den analytischen Darstellungen mittels eines eigens entworfenen Algorithmus bestimmt. Dabei werden sowohl Anzahl als auch Position der Punkte bezüglich eines vorgegebenen Genauigkeitsparameters optimiert.

Für die Simulation thermischer Neutronen in chemisch gebundenen Stoffen ist außerdem ein Programmmodul zur Ermittlung der Energie-Richtungsdichten entwickelt worden. Dies wandelt die analytisch gegebenen Parameter der vollelastischen und unelastischen Streuung in Dichtefunktionen im Laborsystem um. Diese Vorverarbeitung ermöglicht eine schnelle und präzise Simulation der thermischen Streuprozesse.

Unter Nutzung der vorgestellten Datenstrukturen und Algorithmen ist ein Strahlungstransportmodul für Neutronen zum Programmsystem AMOS erarbeitet und implementiert worden. Es ist ebenfalls in C++ umgesetzt worden und umfasst etwa 3.800 Programmzeilen. Die laufezeitkritischen Funktionen zur Transport- und Stoßberechnung sind dabei mit Template-Parametern ausgestattet worden. Dies ermöglicht eine flexible Konfiguration bei jeweils optimalem Programmablauf.

Für eine effiziente Erhebung von Stichproben aus den stückweise linear approximierten Energie- und Richtungsdichten der jeweiligen Reaktionen ist die stochastische Trapezmethode für eine und zwei Dimensionen entworfen worden. Weiterhin ist zur schnellen Zuordnung zwischen der kontinuierlichen Neutronenenergie und der aktuellen Energiegruppe eine neuartige Lookup-Methode entwickelt worden, welche für die bei Neutronen näherungsweise logarithmisch verteilte Gruppenstruktur besonders geeignet ist. Das Verfahren ist auch auf den vorhandenen spektralen Fluenzdetektor

sowie den neu entwickelten Reaktionsanzahldetektor angewendet worden, um eine energieaufgelöste Schätzung für beliebige Energieintervalle zu ermöglichen.

Das erarbeitete Neutronentransportmodul ist anhand mehrerer Beispielrechnungen getestet und verifiziert worden. Im Vergleich mit vorhandenen Strahlungstransportprogrammen erreicht es bei gleicher Genauigkeit eine teilweise deutlich höhere Geschwindigkeit. Sowohl das Programm zur Aufbereitung der Daten als auch der Transportalgorithmus sind im Rahmen dieser Arbeit von Grund auf konzipiert und umgesetzt worden. Die gute Übereinstimmung der Ergebnisse zeigt, dass das entwickelte Programmsystem eine vollwertige Alternative zu den vorhandenen Lösungen darstellt. Durch die Möglichkeit, Veränderungen an den Datenaufbereitungs- und Transportalgorithmen vorzunehmen, sind Erweiterungen des Neutronentransportmoduls mit wenig Aufwand möglich. Zukünftig können so etwa neue varianzreduzierende Verfahren oder auch adjungierter Transport implementiert werden.

7 Literaturverzeichnis

- [1] International Organization for Standardization: *Quantities and units - Part 10: Atomic and nuclear physics*. Internationale Norm. ISO 80000-10:2009. (2009)
- [2] The International Commission on Radiation Units and Measurements: *ICRU Report No. 85 - Fundamental Quantities and Units for Ionizing Radiation (Revised)*. In: *Journal of the ICRU* **11** (2011)
- [3] Deutsches Institut für Normung e.V.: *DIN 6814 Begriffe in der radiologischen Technik, Teil 2 Strahlungsphysik*. Norm. DIN 6814-2:2000-07. (2000)
- [4] X-5 Monte Carlo Team: *MCNP - A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5*. Handbuch. LA-UR-03-1987. Los Alamos National Laboratory, Los Alamos (2003)
- [5] Ferrari, A.; Sala, P. R.; Fassò, A.; Ranft, J.: *Fluka: a multi-particle transport code*. Handbuch. CERN-2005-10. CERN - the European Organization for Nuclear Research, Geneva (2005)
- [6] Emmett, M. B.: *The MORSE Monte Carlo Radiation Transport Code System*. Handbuch. ORNL-4972. Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee (1975)
- [7] Niita, K.; Matsuda, N.; Iwamoto, Y. u. a.: *PHITS: Particle and Heavy Ion Transport code System, Version 2.23*. Handbuch. JAEA-Data/Code 2010-022. Japan Atomic Energy Agency, Tokai, Ibaraki (2010)
- [8] Agostinelli, S.; Allison, J.; Amako, K. u. a.: *Geant4 - a simulation toolkit*. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A* **506** (2003), 250-303
- [9] Cullen, D. E.: *TART 2005 - A Coupled Neutron-Photon 3-D, Combinatorial Geometry Time Dependent Monte Carlo Transport Code*. Handbuch. UCRL-SM-218009. Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore (2005)
- [10] Gabler, D.; Henniger, J.; Reichelt, U.: *AMOS - An effective tool for adjoint Monte Carlo photon transport*. In: *Nucl. Instr. Meth. B* **251** (2006), 326-332
- [11] Sommer, D.; Reichelt, U.; Helbig, K. u. a.: *Monte Carlo Simulation of a HP-Ge Pulse Height Spectrum over the Entire Energy Range*. In: *Prog. Nucl. Sci. Techn.* **2** (2011), 908-911
- [12] Koning, A.; Forrest, R.; Kellett, M. u. a.: *The JEFF-3.1 Nuclear Data Library*. Bericht. ISBN 92-64-02314-3. OECD Nuclear Energy Agency, Paris (2006)
- [13] Chadwick, M. B.; Obložinsky, P.; Herman, M. u. a.: *ENDF/B-VII.0: Next Generation Evaluated Nuclear Data Library for Nuclear Science and Technology*. In: *Nuclear Data*

Sheets **107** (2006), 2931-3060

- [14] MacFarlane, R. E.; Muir, D. W.: *The NJOY Nuclear Data Processing System, Version 91.0*. Bericht. LA-12740-M. Los Alamos National Laboratory, Los Alamos (1994)
- [15] MacFarlane, R. E.; Kahler, A. C.: *Methods for Processing ENDF/B-VII with NJOY*. In: *Nuclear Data Sheets* **111** (2010), 2739-2890
- [16] Carlsson, G. A.; Carlsson, C. A.: *Quantities and concepts in radiation dosimetry*. In: *International Journal of Applied Radiation and Isotopes* **33** (1982), 953-965
- [17] Chilton, A. B.: *A Note on the Fluence Concept*. In: *Health Physics* **34** (1978), 715-716
- [18] Chilton, A. B.: *Further Comments on an Alternate Definition of Fluence*. In: *Health Physics* **36** (1979), 637-638
- [19] Boltzmann, L.: *Weitere Studien über das Wärmegleichgewicht unter Gasmolekülen*. Sitzungsbericht. Kaiserliche Akademie der Wissenschaften, Mathematisch-Naturwissenschaftliche Klasse, Wien (1872). Band 66, 2. Abteilung.
- [20] Duderstadt, J. J.; Martin, W. R.: *Transport Theory*. John Wiley & Sons, Inc., New York (1979)
- [21] Lux, I.; Koblinger, L.: *Monte Carlo Particle Transport Methods: Neutron and Photon Calculations*. CRC Press, Boston (1990)
- [22] Gbur, G. J.: *Mathematical Methods for Optical Physics and Engineering*. Cambridge University Press, Cambridge (2011)
- [23] Hengartner, W.; Theodorescu, R.: *Einführung in die Monte-Carlo-Methode*. VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin (1978)
- [24] Hesse, C.: *Angewandte Wahrscheinlichkeitstheorie*. Vieweg-Verlag, Braunschweig (2003)
- [25] L'Ecuyer, P.; Panneton, F.: *Fast random number generators based on linear recurrences modulo 2: Overview and comparison*. In: Kuhl, M. E.; Steiger, N. M.; Armstrong, F. B.; Joines, J. A. (Hrsg.): *Proceedings of the 2005 Winter Simulation Conference*. ACM: Association for Computing Machinery (2005)
- [26] Devroye, L.: *Non-Uniform Random Variate Generation*. Springer-Verlag, New York (1986)
- [27] Kronmal, R. A.; Peterson, A. V. J.: *On the Alias Method for Generating Random Variables from a Discrete Distribution*. In: *The American Statistician* **33** (1979), 214-218

- [28] Marsaglia, G.; Tsang, W. W.: *A fast, easily implemented method for sampling from decreasing or symmetric unimodal density functions*. In: *SIAM J. Sci. Stat. Comput.* **5** (1984), 349-359
- [29] Marsaglia, G.; Tsang, W. W.: *The Ziggurat Method for Generating Random Variables*. In: *J. Stat. Soft.* **5** (2000), 1-7
- [30] Konvalinka, C.: *Erweiterung des Strahlungstransportprogramms AMOS zur Berechnung von Strahlungsfeldern um varianzreduzierende Methoden*. Diplomarbeit. TU Dresden, Fachrichtung Physik (2011)
- [31] Kockelkorn, U.: *Statistik für Anwender*. Springer Verlag, Berlin (2012)
- [32] Plato, R.: *Numerische Mathematik kompakt*. 3., aktual. u. verb. Aufl. Vieweg Verlag, Wiesbaden (2006)
- [33] Henniger, J.: *Wechselwirkung Strahlung - Stoff*. Vorlesung. TU Dresden, Fachrichtung Physik (2012)
- [34] Henniger, J.: *Grundlagen der Abschirmberechnungen mit Monte-Carlo-Methoden*. In: *Wissenschaftliche Zeitschrift der Technischen Universität Dresden* **39** (1990), 9-16. Thematische Reihe "Ingenieurwissenschaftliche Grundlagen der Energiewirtschaft", Nr. 4.
- [35] McKinney, G.: *Review of Monte Carlo All-Particle Transport Codes and Overview of Recent MCNPX Features*. In: *Proceedings of the International Workshop on Fast Neutron Detectors PoS(FNDA2006) 088* (2006)
- [36] Goorley, T.; James, M.; Booth, T. u. a.: *Initial MCNP6 Release Overview - MCNP6 Beta 2*. Bericht. LA-UR-11-07082. Los Alamos National Laboratory, Los Alamos (2006)
- [37] Guardiola, C.; Amgarou, K.; Garcia, F. u. a.: *Geant4 and MCNPX simulations of thermal neutron detection with planar silicon detectors*. In: *Journal of Instrumentation* **6** (2011), T09001
- [38] Ogheard, F.; Chartier, J. L.; Cassette, P.: *Monte-Carlo simulations of the new LNHB manganese bath facility*. In: *Applied Radiation and Isotopes* **70** (2012), 794-801
- [39] Cullen, D. E.: *TART95: A Coupled Neutron-Photon Monte Carlo Transport Code*. Handbuch. UCRL-MA-121319. Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore (1995)
- [40] Aarnio, P. A.; Fassò, A.; Ferrari, A. u. a.: *FLUKA: Hadronic benchmarks and applications*. Bericht. CERN-TIS-RP/93-08/CF. CERN, Genf (1993)

- [41] Deutsches Institut für Normung e.V.: *DIN 6802 Neutronendosimetrie, Teil 1*. Norm. DIN 6802-1:1991-11. (1991)
- [42] Mayer-Kuckuk, T.: *Kernphysik*. 6., durchges. Aufl. Teubner-Verlag, Stuttgart (1994)
- [43] Nuclear Energy Agency: *Evaluated Nuclear Data Library Descriptions*. In: *Nuclear Data Services*. URL: http://www.oecd-neo.org/dbdata/data/nds_eval_libs.htm
Zugriff: August 2012
- [44] Tsvetkov, P.; Waltar, A.: *Nuclear Data and Cross Section Processing*. In: Waltar, A.; Todd, D. R.; Tsvetkov, P. (Hrsg.): *Fast Spectrum Reactors*. Springer Verlag, New York (2012)
- [45] Brookhaven National Laboratory: *ENDF-6 Formats Manual*. (2009)
- [46] Soppera, N.; Bossant, M.; Henriksson, H. u. a.: *Recent upgrades to the nuclear data tool JANIS*. In: *International Conference on Nuclear Data for Science and Technology 2007* (2007), 204
- [47] Fischer, H.; Kaul, H.: *Mathematik für Physiker*. Bd. 2: Gewöhnliche und partielle Differentialgleichungen, mathematische Grundlagen der Quantenmechanik. 2., überarb. u. erw. Auflage. Teubner Verlag, Wiesbaden (2004)
- [48] Hempelmann, R.: *Quasielastic Neutron Scattering and Solid State Diffusion*. Bd. 13, Oxford Series on Neutron Scattering in Condensed Matter. Oxford University Press, New York (2000)
- [49] Helbig, K.: *Density correlation functions and the dynamic structure factor of Lyapunov modes in disordered chains*. Diplomarbeit. TU Chemnitz, Institut für Physik (2009)
- [50] Gopalakrishnan, V.; Ganesan, S.: *Self-shielding and energy dependence of dilution cross-section in the resolved resonance region*. In: *Ann. Nucl. Energy* **25** (1998), 839-857
- [51] Bronstein, I. N.; Semendjajew, K. A.; Musiol, G.; Mühlig, H.: *Taschenbuch der Mathematik*. 6., vollst. überarb. u. ergänzte Auflage. Verlag Harri Deutsch, Frankfurt am Main (2005)
- [52] Galati, W.; Brandenberger, J. D.; Weil, J. L.: *Scattering of Neutrons by Carbon from 3 to 7 MeV*. In: *Physical Review C* **5** (1971), 1508-1529
- [53] Velkley, D. E.; Brandenberger, J. D.; Glasgow, D. W. u. a.: *Scattering of Neutrons by Carbon from 7 to 9 MeV*. In: *Physical Review C* **7** (1973), 1736-1742

- [54] Leuner, K.: *Programmierung und Test eines Neutronen-Zufallswegsimulators für ein modular aufgebautes Monte-Carlo-Programm zur Simulation des gekoppelten Neutronen-Gamma-Strahlungstransports*. Diplomarbeit. TU Dresden, Fachrichtung Physik (1990)
- [55] Hahn, E.: *Berechnung von Gruppenkonstanten für den Neutronentransport in moderierenden Materialien*. Diplomarbeit. TU Dresden, Fachrichtung Physik (1992)
- [56] Bretschneider, R.: *Durchführung von Strahlungstransportrechnungen für die Detektorphysik*. Diplomarbeit. TU Dresden, Fachrichtung Physik (1993)
- [57] Thiele, H.: *Durchführung von Strahlungstransportrechnungen mit einer hohen räumlichen und spektralen Auflösung*. Diplomarbeit. TU Dresden, Fachrichtung Physik (2000)
- [58] Dang, H.-T.: *Anwendung der Monte-Carlo-Methode zur Lösung spezieller Probleme des Photonentransports*. Dissertation. TU Dresden (2001)
- [59] Dittrich, S.: *Grundlagen für Elektronen-Transportrechnungen mit Monte-Carlo-Methoden*. Diplomarbeit. TU Dresden, Fachrichtung Physik (2002)
- [60] Gabler, D.: *Implementierung des adjungierten Teilchentransports in nichtanaloge Monte-Carlo-Algorithmen*. Diplomarbeit. TU Dresden, Fachrichtung Physik (2005)
- [61] Kriesten, U.: *Erweiterung des Strahlungstransportprogramms AMOS zur Berechnung von Strahlungsfeldern hochenergetischer Elektronen mit Energien bis 40 MeV*. Diplomarbeit. TU Dresden, Fachrichtung Physik (2008)
- [62] Coleman, W. A.: *Mathematical Verification of a Certain Monte Carlo Sampling Technique and Applications of the Technique to Radiation Transport Problems*. In: *Nuclear Science and Engineering* **32** (1968), 76-81
- [63] Cullen, D. E.: *THERMAL: A Routine Designed to Calculate Neutron Thermal Scattering*. Bericht. UCRL-ID-120560, Rev. 1. Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore (1995)
- [64] Knuth, D. E.: *The Art of Computer Programming*. Bd. 3: Sorting and Searching. 2. Auflage. Addison Wesley, Reading (1998)
- [65] Floating-Point Working Group: *IEEE Standard for Floating-Point Arithmetic*. Standard. IEEE Std 754-2008. Microprocessor Standards Committee of the IEEE Computer Society, New York (2008)
- [66] Pönitz, E.: *private Mitteilung*. Technische Universität Dresden, Institut für Kern- und Teilchenphysik, AG Strahlungsphysik (2012)

- [67] Miller, D. W.: *Neutron Total Cross Section Measurements*. In: Marion, J. B.; Fowler, J. L. (Hrsg.): *Fast Neutron Physics*. Bd. II: Experiments and Theory. 1. Auflage. John Wiley & Sons, New York (1963)
- [68] Whalen, D. J.; Cardon, D. A.; Uhle, J. L.; Hendricks, J. S.: *MCNP: Neutron Benchmark Problems*. Bericht. LA-12212. Los Alamos National Laboratory, Los Alamos (1991)
- [69] Cullen, D. E.; Hansen, L. F.; Lent, E. M.; Plechaty, E. F.: *Thermal Scattering Law Data*. Bericht. UCRL-ID-153656. Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore (2003)
- [70] McKinney, G. W.; Durkee, J. W.; Hendricks, J. S. u. a.: *MCNPX 2.5.0 - New Features Demonstrated*. Bericht. LA-UR-04-8695. Los Alamos National Laboratory, Los Alamos (2005)
- [71] QUADOS - Quality Assurance of Computational Tools for Dosimetry: *Intercomparison on the usage of Computational Codes in Radiation Dosimetry*. ENEA - Italian National Agency for New Technologies, Energy and the Environment, Rom (2004)
- [72] International Organisation for Standardization: *Reference Neutron Radiations Part 1: Characteristics and Methods of Production*. Internationale Norm. ISO 8529-1:2000. (2000)
- [73] Booth, T. E.: *A weight window/importance generator for Monte Carlo streaming problems*. Bericht. LA-UR-83-1138. Los Alamos National Laboratory, Los Alamos (1984)
- [74] Konvalinka, C.: *private Mitteilung*. Technische Universität Dresden, Institut für Kern- und Teilchenphysik, AG Strahlungsphysik (2012)
- [75] Reichelt, U.: *private Mitteilung*. Technische Universität Dresden, Institut für Kern- und Teilchenphysik, AG Strahlungsphysik (2012)

Erklärung

Hiermit versichere ich, dass ich die vorliegende Arbeit ohne unzulässige Hilfe Dritter und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Hilfsmittel angefertigt habe; die aus fremden Quellen direkt oder indirekt übernommenen Gedanken sind als solche kenntlich gemacht. Die Arbeit wurde bisher weder im Inland noch im Ausland in gleicher oder ähnlicher Form einer anderen Prüfungsbehörde vorgelegt.

Ich bestätige, dass ich bisher nicht erfolglos an einem Promotionsverfahren teilgenommen habe. Die Promotionsordnung der mathematisch-naturwissenschaftlichen Fakultät der Technischen Universität Dresden in der aktuellen Fassung vom 23.02.2011 erkenne ich an.

Die vorliegende Arbeit ist in der Arbeitsgruppe Strahlungsphysik des Instituts für Kern- und Teilchenphysik an der mathematisch-naturwissenschaftlichen Fakultät der Technischen Universität Dresden unter der wissenschaftlichen Betreuung von Herrn PD Dr. Jürgen Henniger angefertigt worden.

Kai Helbig

Danksagung

Hiermit möchte ich mich herzlich bei allen Mitarbeitern und Studenten der Arbeitsgruppe Strahlungsphysik für die angenehme Arbeitsatmosphäre und viele anregende Diskussionen bedanken.

Mein besonderer Dank gilt Herrn PD Dr. Jürgen Henniger für die umfassende fachliche Betreuung der Arbeit und für viele hilfreiche Hinweise. Bei Herrn Dr. Erik Pönitz bedanke ich mich für seine stete Bereitschaft, meine Fragen zur Neutronenphysik zu beantworten und meine Ideen für die Umsetzung des Transportprogramms zu diskutieren, sowie für die von ihm durchgeführten Vergleichsrechnungen mit MCNP. Herrn Christoph Konvalinka danke ich für die vielfältigen Diskussionen über Programmierverfahren und Designentscheidungen. Schließlich möchte ich Herrn Dr. Pönitz, Herrn Konvalinka und Herrn Uwe Reichelt für die kritische Lektüre der Arbeit danken.

A Herleitung der integralen Strahlungstransportgleichung

Die Strahlungstransportgleichung Boltzmann'schen Typs bezüglich der spektralen Radianz $\varphi_{E\Omega}$ eines Strahlungsfelds ist durch die partielle Integro-Differentialgleichung

$$\begin{aligned} \frac{1}{v} \frac{d}{dt} \varphi_{E\Omega}(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t) &\equiv \frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} \varphi_{E\Omega}(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t) + \boldsymbol{\Omega} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \varphi_{E\Omega}(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t) \\ &= \chi_{E\Omega}(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t) - \zeta_{E\Omega}(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t) \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

gegeben. Die Abnahme der spektrale Radianz wird durch die spektrale, raumwinkelbezogene Stoßratendichte

$$\zeta_{E\Omega}(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t) = \Sigma_t(\mathbf{r}, E) \cdot \varphi_{E\Omega}(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t), \quad (\text{A.2})$$

die Zunahme durch die spektrale, raumwinkelbezogene Emissionsratendichte

$$\begin{aligned} \chi_{E\Omega}(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t) &= \mathcal{C}(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, \boldsymbol{\Omega}' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}) \circ [\Sigma_t(\mathbf{r}, E') \cdot \varphi_{E\Omega}(\mathbf{r}, E', \boldsymbol{\Omega}', t)] \\ &\quad + s_{E\Omega}(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t) \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

beschrieben. Der Stoßintegraloperator \mathcal{C} ist dabei bezüglich einer beliebigen Funktion $f(E, \boldsymbol{\Omega})$ über

$$\begin{aligned} \mathcal{C}(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, \boldsymbol{\Omega}' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}) \circ f(E', \boldsymbol{\Omega}') &= \iint_{4\pi} \int_0^\infty \frac{1}{\Sigma_t(\mathbf{r}, E')} \sum_{l,m} Y^{(l,m)}(E') \cdot \Sigma_{E\Omega}^{(l,m)}(\mathbf{r}, E', E, \mu(\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}')) \\ &\quad \cdot f(E', \boldsymbol{\Omega}') dE' d\boldsymbol{\Omega}' \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

definiert. Es bezeichnen Σ_t die totale Wirkungsquerschnittsdichte, $\Sigma_{E\Omega}^{(l,m)}$ die differentielle Wirkungsquerschnittsdichte der Reaktion m am Nuklid l und $Y^{(l,m)}$ die Ausbeute der Reaktion an Strahlungsteilchen.

Unter der Annahme, dass die spektrale Radianz am Rand des betrachteten Phasenraumvolumens verschwindet, lässt sich dieser Ausdruck durch Elimination der Zeitableitung in eine reine Integralgleichung umformen. Die folgende Herleitung basiert auf Duderstadt und Martin*. Alternative Darstellungen sind beispielsweise bei Emmett† oder Lux und Koblinger‡ zu finden.

Es wird ausgenutzt, dass die Bewegung der Teilchen zwischen aufeinanderfolgenden Streuereignissen geradlinig-gleichförmig mit der Geschwindigkeit v stattfindet, und

* Duderstadt, J. J.; Martin, W. R.: *Transport Theory*. John Wiley & Sons, Inc, New York (1979)

† Emmett, M. B.: *The MORSE Monte Carlo Radiation Transport Code System*. Handbuch. ORNL-4972. Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee (1975)

‡ Lux, I.; Koblinger, L.: *Monte Carlo Particle Transport Methods: Neutron and Photon Calculations*. CRC Press, Boston (1990)

somit der Ort keine unabhängige Koordinate ist, sondern bezüglich beliebiger Werte \mathbf{r}_0 und t_0 über die Parametrisierung

$$\mathbf{r}(E, \boldsymbol{\Omega}, t) = \mathbf{r}_0 + \mathbf{v}(E) \cdot (t - t_0) = \mathbf{r}_0 + \boldsymbol{\Omega} \cdot v(E) \cdot (t - t_0) \quad (\text{A.5})$$

dargestellt werden kann. Für die folgenden Überlegungen werden E und $\boldsymbol{\Omega}$ jeweils als konstant angenommen und daher abkürzend $\mathbf{r}(t)$ geschrieben.

An einem Wechselwirkungsort \mathbf{r}_0 treffen alle Teilchen einer bestimmten Energie und Richtung ein, welche jeweils an Orten $\mathbf{r}(t), t < t_0$ emittiert wurden, sofern sie nicht dazwischen eine Wechselwirkung erfahren. Die Abnahme der spektralen Fluenz durch Wechselwirkungen an jedem dazwischenliegenden Ort $\mathbf{r}(t')$ je Zeit wird durch die Stoßratendichte $\zeta_{E\Omega}(\mathbf{r}(t), E, \boldsymbol{\Omega}, t)$ beschrieben. Bei Vernachlässigung der Emissionsrate $\chi_{E\Omega}$ wird der Verlauf der spektralen Fluenz entlang der Strecke von $\mathbf{r}(t)$ zu \mathbf{r}_0 nach (A.1) und (A.2) durch

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \varphi_{E\Omega}(\mathbf{r}(t), E, \boldsymbol{\Omega}, t) &= -v \cdot \zeta_{E\Omega}(\mathbf{r}(t), E, \boldsymbol{\Omega}, t) \\ &= -v \cdot \Sigma_t(\mathbf{r}(t), E) \cdot \varphi_{E\Omega}(\mathbf{r}(t), E, \boldsymbol{\Omega}, t) \\ \Rightarrow \varphi_{E\Omega}^{(0)}(\mathbf{r}_0, E, \boldsymbol{\Omega}, t_0) &= \varphi_{E\Omega}(\mathbf{r}(t), E, \boldsymbol{\Omega}, t) \cdot \exp\left(-\int_t^{t_0} v \cdot \Sigma_t(\mathbf{r}(t'), E) dt'\right) \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

charakterisiert. Da Beiträge von Teilchen vernachlässigt werden, welche auf der Verbindungsstrecke erzeugt worden sind, beschreibt $\varphi_{E\Omega}^{(0)}$ nur die spektrale Radianz von Teilchen, welche zu t bei $\mathbf{r}(t)$ emittiert wurden und stellt keine vollständige Lösung der Transportgleichung dar.

Die Zeitableitung

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left[\varphi_{E\Omega}(\mathbf{r}(t), E, \boldsymbol{\Omega}, t) \cdot \exp\left(-\int_t^{t_0} v \cdot \Sigma_t(\mathbf{r}(t'), E) dt'\right) \right] \\ = \left[\frac{d}{dt} \varphi_{E\Omega}(\mathbf{r}(t), E, \boldsymbol{\Omega}, t) + v \cdot \Sigma_t(\mathbf{r}(t), E) \cdot \varphi_{E\Omega}(\mathbf{r}(t), E, \boldsymbol{\Omega}, t) \right] \\ \cdot \exp\left(-\int_t^{t_0} v \cdot \Sigma_t(\mathbf{r}(t'), E) dt'\right) \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

des Ausdrucks beinhaltet daher neben der Stoßratendichte auch eine explizite Ableitung der spektralen Radianz. Durch Einsetzen der Boltzmann'schen Transportgleichung (A.1) für die Summe aus Zeitableitung und Stoßratendichte ergibt sich

$$\begin{aligned} & \frac{1}{v} \frac{d}{dt} \left[\varphi_{E\Omega}(\mathbf{r}(t), E, \boldsymbol{\Omega}, t) \cdot \exp \left(- \int_t^{t_0} \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\Sigma}_t(\mathbf{r}(t'), E) dt' \right) \right] \\ &= \chi_{E\Omega}(\mathbf{r}(t), E, \boldsymbol{\Omega}, t) \cdot \exp \left(- \int_t^{t_0} \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\Sigma}_t(\mathbf{r}(t'), E) dt' \right). \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Wird diese Gleichung auf beiden Seiten über die Zeit t integriert, so kann über den Hauptsatz der Differential- und Integralrechnung die Zeitableitung eliminiert werden.

$$\begin{aligned} & \frac{1}{v} \left[\varphi_{E\Omega}(\mathbf{r}_0, E, \boldsymbol{\Omega}, t_0) - \varphi_{E\Omega}(\mathbf{r}(-\infty), E, \boldsymbol{\Omega}, -\infty) \right. \\ & \quad \cdot \exp \left(- \int_{-\infty}^{t_0} \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\Sigma}_t(\mathbf{r}(t'), E) dt' \right) \left. \right] \\ &= \int_{-\infty}^{t_0} \chi_{E\Omega}(\mathbf{r}(t), E, \boldsymbol{\Omega}, t) \cdot \exp \left(- \int_t^{t_0} \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\Sigma}_t(\mathbf{r}(t'), E) dt' \right) dt \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Durch die Forderung, dass die spektrale Radianz am Rand des Phasenraumvolumens verschwinden soll, gilt $\varphi_{E\Omega}(\mathbf{r}(-\infty), E, \boldsymbol{\Omega}, -\infty) = 0$. Für die spektrale Radianz am Ort \mathbf{r}_0 zum Zeitpunkt t_0 folgt damit

$$\begin{aligned} & \varphi_{E\Omega}(\mathbf{r}_0, E, \boldsymbol{\Omega}, t_0) \\ &= v \cdot \int_{-\infty}^{t_0} \chi_{E\Omega}(\mathbf{r}(t), E, \boldsymbol{\Omega}, t) \cdot \exp \left(- \int_t^{t_0} \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\Sigma}_t(\mathbf{r}(t'), E) dt' \right) dt \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

Basierend auf (A.10) wird der sogenannte Transportintegraloperator \mathcal{T} bezüglich einer Funktion $f(\mathbf{r}', t')$ über

$$\begin{aligned} & \mathcal{T}(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}_0, t' \rightarrow t_0) \circ f(\mathbf{r}', t') \\ &= \boldsymbol{\Sigma}_t(\mathbf{r}_0, E) \cdot \mathbf{v} \\ & \quad \cdot \int_{-\infty}^{t_0} f(\mathbf{r}(t'), t') \cdot \exp \left(- \int_{t'}^{t_0} \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\Sigma}_t(\mathbf{r}(t''), E) dt'' \right) dt' \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

eingeführt. Mit den Substitutionen $t' = t_0 - R/v$ und $t'' = t_0 - R'/v$, dem Zusammenhang zwischen Geschwindigkeit und Richtungsvektor $\mathbf{v} = v \cdot \boldsymbol{\Omega}$ sowie der Umbenennung von \mathbf{r}_0 zu \mathbf{r} sowie t_0 zu t lässt sich diese Form in den bekannten Ausdruck

$$\begin{aligned}
& \mathcal{T}(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}, t' \rightarrow t) \circ f(\mathbf{r}', t') \\
&= \Sigma_t(\mathbf{r}, E) \\
& \cdot \int_{-\infty}^0 f\left(\mathbf{r} - \boldsymbol{\Omega} \cdot R, t - \frac{R}{v}\right) \cdot \exp\left(-\int_0^R \Sigma_t(\mathbf{r} - \boldsymbol{\Omega} \cdot R', E) dR'\right) dR.
\end{aligned} \tag{A.12}$$

umformen. Der Transportoperator gibt angewandt auf die Emissionsratendichte den Transportbeitrag der Strahlungsteilchen aus dem gesamten Phasenraum zu einer Reaktion am Ort \mathbf{r} und zum Zeitpunkt t an.

Die Strahlungstransportgleichung nimmt damit ihre endgültige Form

$$\begin{aligned}
\varphi_{E\Omega}(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t) &= \frac{1}{\Sigma_t(\mathbf{r}, E)} \cdot \mathcal{T}(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}, t' \rightarrow t) \circ \chi_{E\Omega}(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t) \\
&= \mathcal{T}(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}, t' \rightarrow t) \circ s_{E\Omega}(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t) + \mathcal{T}(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}, t' \rightarrow t) \\
&\quad \circ \mathcal{C}(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, \boldsymbol{\Omega}' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}) \circ [\Sigma_t(\mathbf{r}, E') \cdot \varphi_{E\Omega}(\mathbf{r}, E', \boldsymbol{\Omega}', t)],
\end{aligned} \tag{A.13}$$

in Kurzform:

$$\Sigma_t \cdot \varphi_{E\Omega} = \mathcal{T} \circ s'_{E\Omega} + \mathcal{T} \circ \mathcal{C} \circ \Sigma'_t \cdot \varphi'_{E\Omega}$$

an. Die gestrichenen Größen deuten die Anwendung der Operatoren durch Integration über das gesamte Phasenraumvolumen an. Äquivalent lässt sich die Transportgleichung bezüglich der spektralen, raumwinkelbezogenen Stoß- oder Emissionsratendichte darstellen. Nach (A.2) und (A.3) ergeben sich die Formen

$$\zeta_{E\Omega} = \mathcal{T} \circ s'_{E\Omega} + \mathcal{T} \circ \mathcal{C} \circ \zeta'_{E\Omega}, \tag{A.14}$$

$$\chi_{E\Omega} = s'_{E\Omega} + \mathcal{C} \circ \mathcal{T} \circ \chi'_{E\Omega}. \tag{A.15}$$

Gleichungen (A.13), (A.14) und (A.15) stellen jeweils Fredholm'sche Integralgleichungen zweiter Art dar[§].

[§] Gbur, G. J.: *Mathematical Methods for optical Physics and Engineering*. Cambridge University Press, Cambridge 2011

B Transformation der Richtung von gestreuten Teilchen

Im Rahmen einer stochastischen Strahlungstransportsimulation muss nach jeder Wechselwirkung die Flugrichtung $\boldsymbol{\Omega}$ der emittierten Teilchen berechnet werden. Die Verteilung des Polarwinkels zwischen einfallendem und emittiertem Teilchen ist in Form einer Dichtefunktion $f(\mu)$ des Richtungskosinus $\mu = \cos \theta$ gegeben. Dabei wird Isotropie des Azimutalwinkels ϕ angenommen, sodass sich die Stichprobe der neuen Richtung des Teilchens bezogen auf die Flugrichtung $\boldsymbol{\Omega}_F = (0, 0, 1)^T$ des einfallendem Teilchens im mitgeführten Koordinatensystem durch

$$\boldsymbol{\Omega}'_F = \begin{pmatrix} \sqrt{1 - \mu^2} \cdot \cos \phi \\ \sqrt{1 - \mu^2} \cdot \sin \phi \\ \mu \end{pmatrix} \quad (\text{B.1})$$

ausdrücken lässt. Um diese in das Laborsystem zu transformieren, muss eine Rotationsmatrix \mathbf{Q} konstruiert werden. Dazu wird zunächst berücksichtigt, dass für Vorwärtstreuung ($\mu = 1$) die ursprüngliche Flugrichtung

$$\boldsymbol{\Omega} = \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} \quad (\text{B.2})$$

durch die Drehmatrix reproduziert werden muss. Mit $\boldsymbol{\Omega} = \mathbf{Q} \cdot \boldsymbol{\Omega}_F$ ist damit zunächst

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \cdot & \cdot & u \\ \cdot & \cdot & v \\ \cdot & \cdot & w \end{pmatrix} \quad (\text{B.3})$$

bekannt. Da Rotationsmatrizen aus einem Rechtssystem orthonormaler Vektoren bestehen, können die beiden fehlenden Spalten jeweils durch Bildung des Kreuzprodukts mit der gegebenen Spalte konstruiert werden. Als Startvektor wird $\mathbf{e}_z = (0, 0, 1)^T$ gewählt*. Somit folgt für die Richtungen der fehlenden Spaltenvektoren

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{q}}_1 &= \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v \\ -u \\ 0 \end{pmatrix} \\ \tilde{\mathbf{q}}_2 &= \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} v \\ -u \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u \cdot w \\ v \cdot w \\ -u^2 - v^2 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

sowie für deren Normierung

$$\begin{aligned} |\tilde{\mathbf{q}}_1| &= \sqrt{u^2 + v^2} \stackrel{\text{def}}{=} q \\ |\tilde{\mathbf{q}}_2| &= \sqrt{(u^2 + v^2) \cdot (u^2 + v^2 + w^2)} = \sqrt{u^2 + v^2} = q, \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

wobei die Normiertheit des Richtungsvektors $\boldsymbol{\Omega}$ benutzt worden ist. Insgesamt ist die Drehmatrix vollständig durch

* Dies ist möglich, solange $w \not\equiv u$ oder $w \not\equiv v$. Falls hingegen $w \equiv 1$, ist $\boldsymbol{\Omega}$ parallel zu \mathbf{e}_z , sodass das Kreuzprodukt einen Nullvektor ergibt.

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \frac{\tilde{q}_1}{q} & \frac{\tilde{q}_2}{q} & \Omega \end{pmatrix} \quad (\text{B.6})$$

bestimmt und die neue Richtung des Streuteilchens kann über

$$\begin{aligned} \Omega' &= \mathbf{Q} \cdot \Omega_F' \\ u' &= \sqrt{\frac{1 - \mu^2}{u^2 + v^2}} \cdot (v \cdot \cos \phi + u \cdot w \cdot \sin \phi) + u \cdot \mu \\ v' &= \sqrt{\frac{1 - \mu^2}{u^2 + v^2}} \cdot (-u \cdot \cos \phi + u \cdot w \cdot \sin \phi) + v \cdot \mu \\ w' &= -\sqrt{(1 - \mu^2) \cdot (u^2 + v^2)} \cdot \sin \phi + w \cdot \mu \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

berechnet werden. Um numerische Schwierigkeiten zu vermeiden, muss der Fall $w \rightarrow 1$ separat behandelt werden. Dazu wird als Startvektor für die Bildung des Kreuzprodukts $\mathbf{e}_x = (1, 0, 0)^T$ genutzt. Die entstehenden Transformationsgleichungen

$$\begin{aligned} u' &= -\sqrt{(1 - \mu^2) \cdot (v^2 + w^2)} \cdot \sin \phi + u \cdot \mu \\ v' &= \sqrt{\frac{1 - \mu^2}{v^2 + w^2}} \cdot (w \cdot \cos \phi + u \cdot v \cdot \sin \phi) + v \cdot \mu \\ w' &= \sqrt{\frac{1 - \mu^2}{v^2 + w^2}} \cdot (-v \cdot \cos \phi + u \cdot w \cdot \sin \phi) + w \cdot \mu \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

sind gleichwertig mit (B.7) und können eingesetzt werden, solange u klein gegen 1 ist. Im verwendeten Algorithmus wird als Entscheidungskriterium $w > 1/\sqrt{2}$ verwendet[†].

[†] Dann gilt sicher $w > u \wedge w > v$.